

# **Inaugural-Dissertation**

**zur  
Erlangung der Doktorwürde  
der  
Naturwissenschaftlich-Mathematischen  
Gesamtfakultät  
der Ruprecht-Karls-Universität  
Heidelberg**

vorgelegt von  
**Dipl.-Phys. Timo Friedhelm Bergmann**  
aus Kassel

Tag der mündlichen Prüfung: 19.07.2006



Theorie des longitudinalen Atomstrahl-Spinechos  
und  
paritätsverletzende Berry-Phasen in Atomen

**Gutachter:** Prof. Dr. Otto Nachtmann  
Priv.-Doz. Maarten DeKieviet, PhD.



## **Theorie des longitudinalen Atomstrahl-Spinechos und paritätsverletzende Berry-Phasen in Atomen**

In dieser Arbeit entwickeln wir eine nichtrelativistische Theorie zur quantenmechanischen Beschreibung longitudinaler Atomstrahl-Spinecho-Experimente, bei denen ein Strahl neutraler Atome eine Anordnung statischer elektrischer und magnetischer Felder durchquert. Der Gesamtzustand des Atoms ist die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit matrixwertigem Potential und kann als Superposition lokaler (atomarer) Eigenzustände der Potentialmatrix geschrieben werden. Die orts- und zeitabhängigen Amplitudenfunktionen jedes Eigenzustands repräsentieren die atomaren Wellenpakete und können mit der von uns aufgestellten Master-Formel in einer Reihenentwicklung berechnet werden. Die nullte Ordnung dieser Reihenentwicklung beschreibt den adiabatischen Grenzfall, in höheren Ordnungen werden Mischungen der Zustände und der zugeordneten Amplitudenfunktionen berücksichtigt. Wir geben eine Anleitung zur theoretischen Beschreibung eines longitudinalen Atomstrahl-Spinecho-Experiments und des sogenannten Fahrplanmodells an, bei dem die Schwerpunktsbewegung der Wellenpakete in den angelegten Feldern grafisch dargestellt wird. Die Schwerpunktsbewegung der Wellenpakete wird dabei durch die unterschiedliche Aufspaltung der lokalen Eigenwerte der Potentialmatrix bestimmt. Wir studieren als Beispiel für eine Anwendung der Theorie paritätsverletzende, geometrische (Berry-)Phasen in Atomen. In diesem Zusammenhang führen wir geometrische Flussdichten ein, mit denen man für spezielle Feldkonfigurationen die geometrischen Phasen direkt anhand eines Vektordiagramms veranschaulichen kann. Am Beispiel einer bestimmten Feldkonfiguration zeigen wir die Existenz einer paritätsverletzenden geometrischen Phase.

## **Theory of Longitudinal Atomic Beam Spin Echo and Parity Violating Berry-Phases in Atoms**

We present a nonrelativistic theory for the quantum mechanical description of longitudinal atomic beam spin echo experiments, where a beam of neutral atoms is subjected to static electric and magnetic fields. The atomic wave function is the solution of a matrix-valued Schrödinger equation and can be written as superposition of local (atomic) eigenstates of the potential matrix. The position- and time-dependent amplitude function of each eigenstate represents an atomic wave packet and can be calculated in a series expansion with a master formula that we derive. The zeroth order of this series expansion describes the adiabatic limit, whereas the higher order contributions contain the mixing of the eigenstates and the corresponding amplitude functions. We give a tutorial for the theoretical description of longitudinal atomic beam spin echo experiments and for the so-called Fahrplan model, which is a visualisation tool for the propagation of wave packets of different atomic eigenstates. As an example for the application of our theory, we study parity violating geometric (Berry-)phases. In this context, we define geometric flux densities, which for certain field configurations can be used to illustrate geometric phases in a vector diagram. Considering an example with a specific field configuration, we prove the existence of a parity violating geometric phase.



*Für Dajana und Elena.*





# Inhaltsverzeichnis

---

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>i</b>
<b>Notation und Konventionen</b>	<b>v</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Historischer Rückblick . . . . .	1
1.2 Motivation . . . . .	4
1.3 Gliederung der Arbeit . . . . .	5
<b>2 Vorbetrachtungen</b>	<b>7</b>
2.1 Longitudinales Atomstrahl-Spinecho . . . . .	7
2.2 Die Charakteristiken-Lösung . . . . .	8
2.2.1 Eine Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung . . . . .	8
2.2.2 Eigenschaften der Charakteristiken-Lösung . . . . .	11
2.3 Die WKB-Lösung . . . . .	15
2.3.1 Eine verbesserte Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung . . .	15
2.3.2 Eigenschaften der WKB-Lösung . . . . .	20
<b>3 Anwendungen der WKB-Lösung</b>	<b>25</b>
3.1 Streuung an der Potentialstufe . . . . .	25
3.1.1 Rechnung für ebene WKB-Wellen . . . . .	25
3.1.2 Anwendungen der Näherung der WKB-Lösung . . . . .	28
3.1.3 Superposition des Wellenpakets . . . . .	30
3.2 Streuung am Potentialwall . . . . .	32
3.2.1 Rechnung für ebene WKB-Wellen . . . . .	32
3.2.2 Anwendungen der Näherung der WKB-Lösung . . . . .	34
3.3 Anwendung auf ein einfaches, longitudinales Atomstrahl-Spinecho-Experiment . . . . .	37
3.3.1 Grundlagen zur Beschreibung eines Atoms mit mehreren inneren Zuständen . . . . .	38
3.3.2 Zusammenhang mit früheren Arbeiten . . . . .	39
3.3.3 Das Fahrplanmodell . . . . .	42

---

3.3.4	Die Berechnung des Interferenzsignals . . . . .	48
3.3.5	Abschließende Diskussion . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung mit skalarem Potential</b>	<b>57</b>
4.1	Ein kurzer Rückblick auf die Charakteristiken- und die WKB-Lösung . .	57
4.2	Die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit skalarem Potential . . . . .	58
4.2.1	Umschreiben der Schrödinger-Gleichung . . . . .	59
4.2.2	Aufstellen und Lösen der Integralgleichung . . . . .	61
4.2.3	Variablentransformation in der WKB-Lösung . . . . .	64
4.2.4	Anfangsbedingungen und Diskussion der Lösung . . . . .	66
4.3	Anwendung des Formalismus . . . . .	67
4.3.1	Verwendung des WKB-Phasenwinkels . . . . .	67
4.3.2	Verwendung des Charakteristiken-Phasenwinkels . . . . .	69
4.3.3	Vergleich der beiden Entwicklungen . . . . .	70
4.3.4	Abschätzung der Gültigkeit der WKB-Lösung . . . . .	77
4.3.5	Ein Verfahren zur Berücksichtigung der Dispersion des Wellenpakets	79
4.4	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen . . . . .	83
<b>5</b>	<b>Implementation komplexer, skalarer Potentiale</b>	<b>85</b>
5.1	Problemstellung . . . . .	85
5.2	Anwendung des Formalismus auf ein komplexes, skalares Potential . . . .	86
5.2.1	Berechnung des Integraloperators . . . . .	86
5.2.2	Berechnung der Entwicklung bis zur zweiten Ordnung . . . . .	88
5.3	Berechnung der Entwicklung mit korrigiertem Phasenfaktor und Amplitude	94
5.4	Diskussion und Vergleich der beiden Entwicklungen . . . . .	96
<b>6</b>	<b>Atome mit mehreren inneren Zuständen in matrixwertigen Potentialen</b>	<b>99</b>
6.1	Aufstellen der Schrödinger-Gleichung . . . . .	99
6.2	Lösen der Schrödinger-Gleichung . . . . .	106
6.3	Das Rezept zur theoretischen Beschreibung eines IABSE-Experiments . .	112
6.3.1	Implementierung der Anfangsbedingungen . . . . .	112
6.3.2	Das erweiterte Fahrplanmodell . . . . .	114
6.3.3	Berechnung des Spinechosignals . . . . .	120
<b>7</b>	<b>Paritätsverletzende Berry-Phasen in Wasserstoff</b>	<b>125</b>
7.1	Allgemeine Einführung in geometrische Phasen . . . . .	125
7.2	Geometrische Phasen im Kontext der vorliegenden Arbeit . . . . .	128
7.3	Paritätsverletzende geometrische Phasen . . . . .	134
7.3.1	Paritätsverletzung in Atomen . . . . .	134
7.3.2	Geometrische Flussdichten im Raum der elektrischen und magnetischen Feldstärke . . . . .	136
7.3.3	Die P-erhaltenden und P-verletzenden geometrischen Flussdichten	139

---

---

7.3.4	Numerische Resultate . . . . .	144
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>151</b>
8.1	Zusammenfassung . . . . .	151
8.2	Ausblick . . . . .	155
<b>A</b>	<b>Quantenmechanische Grundlagen</b>	<b>157</b>
A.1	Die Wigner-Weisskopf-Methode . . . . .	157
A.2	Quantenmechanik des Zwei-Teilchen-Problems . . . . .	161
A.3	Störungsrechnung für nichtthermitesche Massenmatrizen . . . . .	167
A.4	Störungstheoretische Berechnung der Ableitungsmatrizen . . . . .	170
A.5	Die Paritätstransformation der geometrischen Flussdichten . . . . .	176
<b>B</b>	<b>Grundlagen für die Beschreibung von metastabilem Wasserstoff und Deuterium</b>	<b>183</b>
B.1	Allgemeine Vorbetrachtungen . . . . .	183
B.1.1	Beiträge zur Massenmatrix . . . . .	183
B.1.2	Vorgehensweise und Formeln zur Berechnung der Massenmatrix . . . . .	185
B.2	Wasserstoff . . . . .	188
B.2.1	Die Massenmatrix im Unterraum mit Hauptquantenzahl $n = 1$ . . . . .	188
B.2.2	Die Massenmatrix im Unterraum mit Hauptquantenzahl $n = 2$ . . . . .	193
B.2.3	Numerische Berechnung der Eigenwerte in elektrischen und magnetischen Feldern . . . . .	205
B.3	Deuterium . . . . .	212
B.3.1	Die Massenmatrix im Unterraum mit Hauptquantenzahl $n = 2$ . . . . .	212
B.3.2	Numerische Berechnung der Eigenwerte in elektrischen und magnetischen Feldern . . . . .	227
<b>C</b>	<b>Die Gabor Transformation</b>	<b>233</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>239</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>241</b>
	<b>Literatur</b>	<b>243</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>249</b>

---



# Notation und Konventionen

---

In der gesamten Arbeiten werden natürliche Einheiten verwendet, d.h. es ist  $\hbar = c = 1$ . Die eigentlich magnetische Flussdichte genannte Größe  $\mathcal{B}$  wollen wir salopp als magnetische Feldstärke bezeichnen. Sie ist nicht zu verwechseln mit  $\mathbf{H} = \mathcal{B}/\mu_0 - \mathbf{M}$  (SI-Einheiten,  $\mathbf{M}$  ist die Magnetisierung). Desweiteren wird die folgende Notation vereinbart:

$\mathbf{L}, \mathbf{S}, \mathbf{J}, \mathbf{I}, \mathbf{F}$	Operatoren für den Bahndrehimpuls des Elektrons ( $\mathbf{L}$ ), den Elektronspin ( $\mathbf{S}$ ), den Gesamtdrehimpuls des Elektrons ( $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ), den Kernspin ( $\mathbf{I}$ ) und den atomaren Gesamtdrehimpuls ( $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$ ).
$ nL_J, F, F_3\rangle$	Atomarer Gesamtdrehimpulszustand ohne Berücksichtigung der Hyperfeinwechselwirkung. Eigenzustand der Drehimpulsoperatoren $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, \mathbf{I}^2, \mathbf{F}^2$ sowie $F_3$ . Die im Atom unveränderlichen Quantenzahlen $S$ und $I$ für den Spin des Elektrons und des Kerns werden in der Notation weggelassen. Die Hauptquantenzahl $n$ soll daran erinnern, dass in der Ortsdarstellung dieser Zustände die (nichtrelativistischen) Wellenfunktionen für Wasserstoff, $\Psi_{n,L,L_3}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,L}(r)Y_{L,L_3}(\vartheta, \varphi)$ , zu verwenden sind.
$\underline{\mathcal{A}}, \underline{\mathcal{B}}, \underline{\mathcal{C}}, \dots$	Matrizen im Unterraum der atomaren Zustände mit fester Hauptquantenzahl $n$ , dargestellt in der Basis $\{ nL_J, F, F_3\rangle\}$ der Gesamtdrehimpulszustände.
$\underline{\mathcal{M}}(Z)$	Die vom Ort $Z$ abhängige (nichthermitesche) Massenmatrix, d.h. die Darstellung des atomaren Hamiltonoperators im Unterraum zu fester Hauptquantenzahl $n$ .
$\alpha = 1, \dots, N$	Index für die Nummerierung der Eigenzustände von $\underline{\mathcal{M}}(Z)$ . Die Dimension des jeweils betrachteten Unterraums zu fester Hauptquantenzahl wird mit $N$ bezeichnet.
$ \alpha(Z)\rangle$	Rechter Eigenzustand mit Index $\alpha$ der Massenmatrix $\underline{\mathcal{M}}(Z)$ zum komplexen Eigenwert $E_\alpha(Z)$ . Auch als atomarer Eigenzustand oder innere atomarer Zustand bezeichnet.

---

$(\widetilde{\alpha(Z)}) $	Linker Eigenzustand von $\underline{\mathcal{M}}(Z)$ zum komplexen Eigenwert $E_\alpha(Z)$ .
$\underline{\mathbb{P}}_\alpha(Z)$	Quasiprojektor $\underline{\mathbb{P}}_\alpha(Z) =  \alpha(Z))(\widetilde{\alpha(Z)}) $ des inneren atomaren Zustands mit Index $\alpha$ .
$\underline{\mathcal{A}}_{\beta\alpha}(Z)$	Matrizelemente der Matrix $\underline{\mathcal{A}}$ bzgl. der lokalen Eigenzustände von $\underline{\mathcal{M}}(Z)$ . Es ist z.B. $\underline{\mathcal{A}}_{\beta\alpha}(Z) = (\beta(Z) \underline{\mathcal{A}} \alpha(Z))$ .
$\Psi_\alpha(Z, t)$	Orts- und zeitabhängige Wellenfunktion des atomaren Zustands mit Index $\alpha$ .
$\phi_\alpha(Z, t)$	Phasenwinkel des in $\Psi_\alpha(Z, t)$ enthaltenen Phasenfaktors.
$A_\alpha(Z, t)$	Amplitudenanteil in $\Psi_\alpha(Z, t)$ .
$\mathcal{E}, \mathcal{B}$	Elektrische und magnetische Feldstärke.
$\partial_x$	Symbol für die partielle Ableitung nach $x$ , $\partial_x = \partial/\partial x$ .
$(\hat{\mathcal{O}}f)(Z, t)$	Bei der Anwendung eines Operators $\hat{\mathcal{O}}$ auf eine Funktion $f(Z, t)$ entstehende Funktion $(\hat{\mathcal{O}}f)(Z, t)$ .
$\hat{L}, \hat{\underline{L}}$	Differentialoperatoren (skalar, matrixwertig).
$\hat{K}, \hat{\underline{K}}$	Integraloperatoren (skalar, matrixwertig).
$d$	Symbol für die äußere Ableitung.
$df$	Äußere Ableitung einer Funktion $f$ (Differentialform, vollständiges Differential einer Funktion).
$dx$	Symbol für ein Differential (z.B. innerhalb eines Integrals oder einer Differentialform).
$\oint_{\mathcal{C}}$	Integral über eine geschlossene Kurve $\mathcal{C}$ .
$\partial\mathcal{F}$	Rand einer Fläche $\mathcal{F}$ .
LABSE	Abkürzung für <i>longitudinal Atomic Beam Spin Echo</i> .
PC	Abkürzung für <i>Parity Conserving</i> .
PV	Abkürzung für <i>Parity Violating</i> .
APV	Abkürzung für <i>Atomic Parity Violation</i> .

---

# Kapitel 1

---

## Einleitung

---

### 1.1 Historischer Rückblick

Das Phänomen der Interferenz, die nichts anderes ist als die Superposition von zwei oder mehr Wellen, ist - ob nun bewusst oder unbewusst - jedem Kind bekannt, das einmal zwei Steine gleichzeitig ins Wasser geworfen hat. Die Amplituden der beteiligten Wellen addieren sich dabei auf und man kann Effekte wie Auslöschung und Verstärkung an verschiedenen Punkten der interferierenden Wellen beobachten.

Dass man mit der Interferenz auch hochpräzise, experimentelle Messungen machen kann, ist in der Physik schon seit sehr langer Zeit bekannt. So nutzte z.B. der Michelson-Morley-Versuch [1, 2], der Ende des 19. Jahrhunderts die Existenz des Äthers zeigen sollte die Wellennatur des Lichts und die damit verbundenen Interferenzeffekte aus. Dieser Versuch basierte auf einem Lichtstrahl, der in zwei zueinander senkrechte Strahlen aufgespalten wurde, die dann nach Reflexion wieder miteinander vereinigt und zur Interferenz gebracht wurden. Der Grundgedanke des Michelson-Morley-Experiments war, dass der sogenannte Ätherwind zu einer Laufzeitdifferenz und somit zu einem Unterschied der relativen Phase der beiden Lichtstrahlen führt, so dass - abhängig von der Ausrichtung des Versuchsaufbaus - relativ zum Ätherwind Interferenzeffekte zu beobachten sind. Die Messgenauigkeit ist dabei im wesentlichen durch die halbe Wellenlänge des verwendeten Lichts gegeben und liegt somit im Bereich von einigen hundert Nanometern. Der Versuch brachte jedoch nicht das damals gewünschte Ergebnis sondern lieferte im Gegenteil einen sehr eindrucksvollen Beweis dafür, dass es den Äther nicht gibt.

Der entscheidende Schritt auf dem Weg zur Interferenz von Materiewellen war die 1924 von Louis Victor, Duc de Broglie in seiner Dissertation [3] eingeführte Beziehung  $\lambda = h/(mv)$ , die einem Teilchen der Masse  $m$  mit einem Impuls  $mv$  eine Wellenlänge  $\lambda$  zuordnet ( $h$  ist das Plancksche Wirkungsquantum). Durch diese Beziehung wurde der bereits von den Eigenschaften des Lichts bekannte Welle-Teilchen-Dualismus nun auch auf massenbehaf-

tete Teilchen übertragen. Die Wellennatur von Atomen wurde wenige Jahre später von Estermann und Stern [4] durch den Nachweis von Beugung an einem Kristallgitter experimentell bestätigt, doch das erste Interferenzexperiment mit Materiewellen (Elektronen) folgte erst in den 50er Jahren von J. Marton *et al.* [5, 6]. Interferometrie mit Neutronen folgte in den 60er [7] und 70er [8] Jahren, bis dann erstmals im Jahre 1991 ein Interferometer für Atome [9] vorgestellt wurde. Der wesentliche Vorteil der Interferometrie mit Atomen gegenüber der Interferometrie mit Elektronen oder Neutronen ist ihre wesentlich komplexere, innere Struktur, durch die sich eine Vielzahl von theoretischen und experimentellen Möglichkeiten eröffnet.

Die Atominterferometrie hat sich seit der damaligen Zeit weiterentwickelt und findet heute zahlreiche Anwendungen in der Atomoptik. Für einen Überblick über das Gebiet sei auf die Artikel [10, 11] und die darin zitierten Referenzen verwiesen. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der theoretischen Beschreibung eines speziellen Atominterferometers, das in Heidelberg von Prof. D. Dubbers und PD M. DeKieviet, PhD., und Mitarbeitern [12] im Jahre 1995 zunächst für Helium und später auch für Wasserstoff und Deuterium [13, 14] entwickelt wurde und auf der Messung atomarer Spinechosignale<sup>1</sup> basiert. Hierbei wird ein sogenanntes Spinechofeld angelegt, das aus zwei hintereinander geschalteten, in Strahlrichtung orientierten, antiparallelen Magnetfeldern besteht. Die Energieniveaus der verschiedenen atomaren Gesamtdrehimpulszustände spalten im Magnetfeld unterschiedlich auf, was zu einem Auseinanderdriften der zugeordneten Wellenpakete führt. Im zweiten, antiparallelen Magnetfeld kann durch geschickte Wahl der Feldstärke ein erneutes Zusammenlaufen der Wellenpakete verursacht werden, so dass es zu einem Überlapp kommt. Durch einen geeigneten Detektor kann man dann die Oszillation der relativen Phase der beteiligten Wellenpakete in Abhängigkeit des angelegten Spinechofeldes als Interferenzsignal (Spinechosignal) messen.

Wie in [12] gezeigt wurde, ist das Heidelberger Atomstrahl-Spinecho-Experiment hochsensitiv auf Änderungen der relativen Phase der atomaren Wellenpakete und ist somit ein interessantes Werkzeug für die Untersuchung einer Reihe von Phänomenen, z.B. in der Oberflächenphysik [15]. Eine weitere Anwendung, die uns in der vorliegenden Arbeit als Motivation für die Entwicklung einer Theorie zur Beschreibung von Atomstrahl-Spinecho-Experimenten dient, ist die Messung paritätsverletzender Effekte in den leichtesten Atomen - Wasserstoff und Deuterium - bei denen man theoretische Rechnungen bis zu großer Genauigkeit durchführen kann.

Bevor wir diesen Zusammenhang weiter diskutieren, wollen wir zunächst einen kurzen Überblick über die historische Entwicklung der Untersuchung von Paritätsverletzung in Atomen geben. Der erste Hinweis auf eine Verletzung der Parität in der Natur war das sogenannte  $\theta$ - $\tau$ -Rätsel. Mit diesen Buchstaben bezeichnete man zwei Teilchen mit gleicher Masse und gleicher Ladung, die aber in zwei bzw. drei Pionen zerfallen, also in

---

<sup>1</sup> Der Zusammenhang zwischen dem Spinecho, das man aus der Kernspinresonanz kennt, und dem hier angewendeten Strahlspinecho wird z.B. in [13], Kapitel 1 ausführlich diskutiert.



Endzustände mit unterschiedlicher Parität. Lee und Yang [16] zogen 1956 daher erstmals die Verletzung der Spiegelsymmetrie in der schwachen Wechselwirkung in Erwägung und betrachteten in diesem Zusammenhang  $\theta$  und  $\tau$  als ein und dasselbe Teilchen. Heute ist die P-Verletzung in der vereinheitlichten Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung ein fester Bestandteil des Standardmodells [17, 18, 19].

In einem Atom ist das Elektron an den positiven Atomkern hauptsächlich durch die elektromagnetische Wechselwirkung gebunden, die durch Austausch virtueller Photonen vermittelt wird. Die schwache Wechselwirkung trägt zu dieser Bindung nur zu einem kleinen Teil durch den sogenannten neutralen schwachen Strom zwischen Elektron und den Quarks im Atomkern bei, der durch den Austausch virtueller, neutraler  $Z$ -Bosonen vermittelt wird, die eine Masse von etwa 90 GeV haben.

Lange vor der experimentellen Entdeckung des neutralen schwachen Stroms<sup>2</sup> untersuchte Ya. B. Zel'dovich [21] im Jahre 1959 den Effekt eines hypothetischen aber mit dem heutigen neutralen schwachen Strom vergleichbaren Beitrag zur Wechselwirkung zwischen Elektron und Atomkern. Er stufte die damit verbundenen Phänomene allerdings als unbeobachtbar ein<sup>3</sup>. Erst viele Jahre später, nachdem der experimentelle Nachweis des neutralen schwachen Stroms erbracht und das Standardmodell der Elementarteilchen aufgestellt war, zeigten M.A. und C. Bouchiat [23] im Jahre 1974, dass der Beitrag der schwachen Wechselwirkung zur Bindung des Elektrons an den Atomkern ungefähr mit der dritten Potenz der Kernladungszahl  $Z$  skaliert. Dies war der Beginn der intensiven theoretischen und experimentellen Untersuchung der Paritätsverletzung in Atomen (APV<sup>4</sup>).

Bereits Ende der 70er Jahre wurde der experimentelle Nachweis der Paritätsverletzung in Atomen von zwei unabhängigen Gruppen an Wismut (Bi,  $Z = 83$ ) und Thallium (Tl,  $Z = 81$ ) erbracht [24, 25] und bis heute werden Experimente auf diesem Gebiet aufgrund der bereits erwähnten Skalierung mit der Kernladungszahl ausschließlich an schweren Atomen durchgeführt. Die Hauptmotivation für die Untersuchung der APV ist auch heute noch die Messung der schwachen Kernladung  $Q_W$ , aus der man den Weinberg-Winkel  $\vartheta_W$  ableiten kann. Das besondere dabei ist, dass der Zugang, den die APV für die Bestimmung des Weinberg-Winkels liefert, komplementär zum Zugang der Hochenergiephysik ist. Wir verweisen für eine ausführliche Diskussion dieser Thematik auf einen Übersichtsartikel der Bouchiats [26] und für einen aktuellen Überblick über den derzeitigen Stand der Untersuchung der APV auf [27].

---

<sup>2</sup>Für einen historischen Überblick über die Entdeckung des neutralen schwachen Stroms verweisen wir auf [20].

<sup>3</sup>Eine gute Darstellung der historischen Entwicklung der Untersuchung der Paritätsverletzung in Atomen findet sich in [22].

<sup>4</sup>In der Literatur wird häufig die Abkürzung APV für *Atomic Parity Violation* verwendet.

---

## 1.2 Motivation

Wir interessieren uns in dieser Arbeit für Paritätsverletzung in leichten Atomen, insbesondere Wasserstoff und Deuterium. Wie oben bereits erwähnt, kann man bei diesen einfachen atomaren Systemen numerische Rechnungen bis zu hoher Genauigkeit durchführen. Die experimentellen Methoden werden immer empfindlicher, wie das Beispiel des Atomstrahl-Spinechos zeigt, so dass nach unserer Meinung die berechtigte Hoffnung besteht, auch bei diesen leichten Atomen P-verletzende Effekte zu messen. Neben der oben diskutierten Motivation der Messung der schwachen Kernladung kann ein Vergleich der theoretischen und experimentellen Resultate eine sehr genaue Bestätigung des Standardmodells bei niedrigen Energien liefern, aber auch Licht in das Dunkel der sogenannten Spinkrise [28, 29] bringen. Mit diesem Begriff wird die auch heute noch bestehende Unsicherheit [30] über die genaue Zusammensetzung des Proton- bzw. Neutronspins bezeichnet, der nur zu einem kleinen Teil von den drei Valenzquarks getragen wird. Für eine ausführlichere Diskussion dieses Zusammenhangs verweisen wir auf [31].

Bereits 1983 wurden von Prof. O. Nachtmann und W. Bernreuther [32] paritätsverletzende Rotationen der Polarisation von Wasserstoff in elektrischen Feldern theoretisch untersucht, in den 90er Jahren wurden diese Ideen weiter ausgebaut [31, 33, 34, 35]. Es wurde eine Methode zur resonanten Verstärkung der P-verletzenden Polarisations-Rotationen in elektrischen Feldern vorgeschlagen [31], P-verletzende Energieverschiebungen und geometrische Phasen [33, 34] studiert, sowie P-verletzende Effekte in atomarem Dysprosium bei beinahe entarteten Energieniveaus untersucht [35].

Im Rahmen der dieser Arbeit vorangegangenen Diplomarbeit [36] untersuchten wir abermals P-verletzende Polarisations-Rotationen in elektrischen Feldern, damals am Beispiel von Deuterium. Wir zeigten die Existenz P-erhaltender Polarisations-Rotationen von Deuterium, einem wesentlich stärkeren Effekt als die P-verletzenden Rotationen, der aus diesem Grund sehr geeignet wäre für ein erstes, vorbereitendes Atomstrahl-Spinecho-Experiment auf dem Weg zur Messung P-verletzender Effekte in leichten Atomen.

Aus der direkten Nachbarschaft zur Atomstrahl-Spinecho-Gruppe um PD M. DeKieviet, PhD., und der vielversprechenden Messgenauigkeit der Apparatur entstand die Motivation, die theoretische Untersuchung der P-verletzenden Effekte bei leichten Atomen in eine quantenmechanische Beschreibung eines Atomstrahl-Spinecho-Experiments einzubetten. In allen vorherigen Arbeiten wurden Atome in Ruhe in zeitabhängigen Potentialen betrachtet, bei denen man sich auf eine quantenmechanische Beschreibung im Hilbertraum der atomaren Zustände beschränken konnte. Bei einem Atomstrahl-Spinecho-Experiment dagegen muss man die Atome darüberhinaus als orts- und zeitabhängige Wellenpakete beschreiben, die die vorgegebene Feldkonfiguration mit einer festgelegten Geschwindigkeitsverteilung durchqueren.

Im Rahmen dieser Arbeit beschränken wir uns auf die Betrachtung des sogenannten lon-

---

itudinalen Atomstrahl-Spinechos, bei dem es nur eine Strahlachse gibt und die Wellenpakete entlang dieser Achse auseinanderdriften und wieder zusammengeführt werden. Im Gegensatz dazu gibt es noch die Möglichkeit des transversalen Atomstrahl-Spinechos, bei dem die Strahlen räumlich getrennt und wieder zusammengeführt werden. Wir beschränken uns weiterhin nur auf zeitunabhängige elektrische und magnetische Felder.

## 1.3 Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit liefert eine ausführliche Herleitung einer Theorie des longitudinalen Atomstrahlstrahl-Spinechos. Obwohl diese Theorie insbesondere für neutrale, wasserstoffähnliche, metastabile Atome in statischen elektrischen und magnetischen Feldern entwickelt wurde, sollte eine Übertragung auf andere Systeme (mit zeitunabhängigem Matrixpotential) ohne größere Schwierigkeiten möglich sein.

In Kapitel 2 gehen wir erste Schritte auf dem Weg zur Beschreibung eines Atomstrahl-Spinecho-Experiments, indem wir zwei einfache Näherungslösungen berechnen, die auf ähnlichen Ansätzen basieren. Wir diskutieren die physikalischen Eigenschaften der beiden Lösungen.

In Kapitel 3 betrachten wir einige Anwendungen der physikalisch sinnvolleren Näherungslösung, die auf der Superposition ebener WKB-Wellen basiert. Wir untersuchen Reflexion und Transmission an einer Potentialstufe und am Potentialwall und geben in Abschnitt 3.3 bereits eine theoretische Beschreibung des sogenannten Fahrplanmodells [14] im adiabatischen Grenzfall an. In diesem Zusammenhang berechnen wir bereits ein erstes Spinechosignal.

In Kapitel 4 entwickeln wir eine Methode zur Berechnung der Lösung der Schrödinger-Gleichung mit reellem, skalarem Potential in Form einer Reihenentwicklung nach Potenzen eines Integraloperators  $\hat{K}$ . Mit Hilfe dieser Methode sind wir dann in der Lage, die Näherungslösungen aus Kapitel 2 quantitativ zu analysieren und zu vergleichen. Wir untersuchen desweiteren die Korrekturen erster Ordnung zur WKB-Näherungslösung und geben ein Verfahren zur Berücksichtigung der Dispersion bereits ab nullter Ordnung der Entwicklung an.

In Kapitel 5 betrachten wir komplexe, skalare Potentiale, bei denen das Wellenpaket mit fortschreitender Zeit zerfällt. Wir demonstrieren die Fähigkeit des Formalismus aus Kapitel 4 zur Selbstkorrektur des ursprünglich angesetzten Phasenfaktors.

In Kapitel 6 übertragen wir alle bis dahin gesammelten Erkenntnisse auf den Fall matrixwertiger Potentiale und gelangen so zu einer Theorie für die Beschreibung longitudinaler Atomstrahl-Spinecho-Experimente. Wir führen eine Erweiterung des Fahrplanmodells auf den nichtadiabatischen Fall ein und geben die allgemeine Vorgehensweise für die Berech-

---

nung eines Atomstrahl-Spinecho-Signals an.

In Kapitel 7 stellen wir dann die Verbindung zur Paritätsverletzung in Atomen her und betrachten als Beispiel paritätsverletzende geometrische Phasen. Wir entwickeln eine grafische Methode zur Veranschaulichung geometrischer Phasen, die im Spezialfall eines konstanten magnetischen (elektrischen) Feldes und veränderlicher elektrischer (magnetischer) Feldstärke angewendet werden kann. Schließlich zeigen wir die Existenz P-verletzender geometrischer Phasen für eine spezielle Feldkonfiguration.

Kapitel 8 schließt den Hauptteil der Arbeit mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick auf zukünftige Arbeiten ab.

In Anhang A werden einige quantenmechanische Grundlagen angegeben, die bei den Rechnungen der vorliegenden Arbeit verwendet wurden. Nach einer Zusammenfassung der für die Beschreibung metastabiler Atome relevanten Wigner-Weisskopf-Methode in Abschnitt A.1 folgt in Abschnitt A.2 eine grundlegende Diskussion des quantenmechanischen Zweiteilchen-Problems, die zur Aufstellung der matrixwertigen Schrödinger-Gleichung führt. Daraufhin geben wir in Abschnitt A.3 Grundlagen für die Störungsrechnung mit nicht-hermiteschen Massenmatrizen an, die wir in Abschnitt A.4 zur Berechnung lokaler Matrixdarstellungen von Ortsableitungsoperatoren einsetzen. Abschnitt A.5 schließt Anhang A mit einer Hilfsrechnung für die Paritätstransformation der in Kapitel 7 behandelten geometrischen Flussdichten ab.

In Anhang B werden alle Grundlagen für die numerische Behandlung von metastabilem Wasserstoff und Deuterium in elektrischen und magnetischen Feldern inklusive der P-verletzenden Beiträge zur Massenmatrix angegeben. Dort finden sich zahlreiche Tabellen mit den Matrixdarstellungen der Operatoren für das magnetische Moment und das Dipolmoment von Wasserstoff und Deuterium, sowie die zugehörigen freien Massenmatrizen.

Anhang C behandelt die sogenannte Gabor-Transformation, die eine Methode zur Superposition von Funktionen mit lokalisierten Wellenpaketen ist. Eine vereinfachte Version dieser Transformation wird in Abschnitt 4.3.5 für das Verfahren zur besseren Berücksichtigung der Dispersion der Wellenpakete in der Reihenentwicklung der Lösung der Schrödinger-Gleichung verwendet.

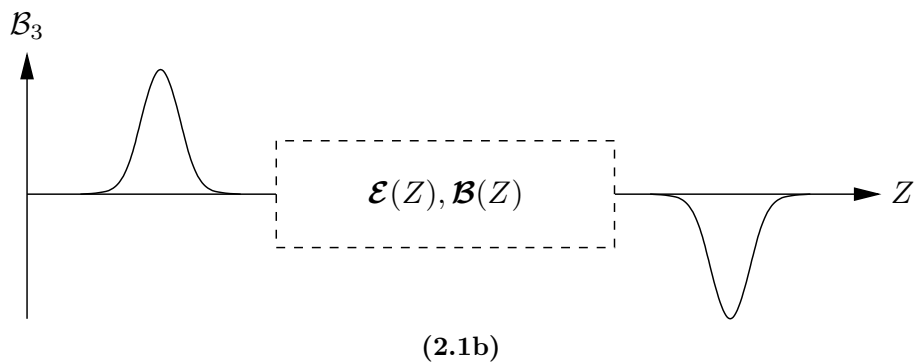
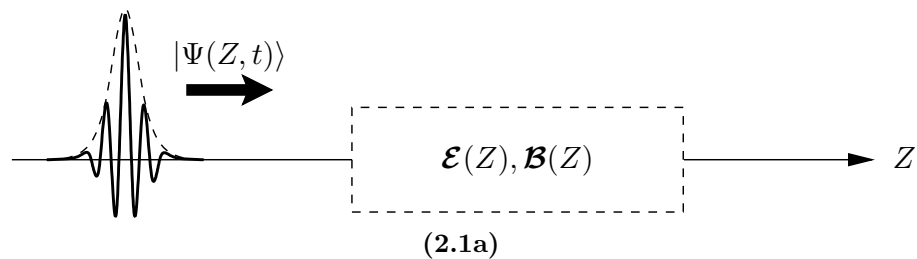
---

# Kapitel 2

## Vorbetrachtungen

### 2.1 Longitudinales Atomstrahl-Spinecho

In diesem Kapitel wollen wir erste Schritte auf dem Weg zur theoretischen Beschreibung eines longitudinalen Atomstrahl-Spinecho-Experiments gehen, bei dem ein Atom eine Anordnung statischer elektrischer und magnetischer Felder durchqueren soll, siehe Abb. 2.1a. Bereits diese sehr oberflächlichen Beschreibung des in der vorliegenden Arbeit betrachte-



**Abbildung 2.1:** Schematischer Aufbau eines longitudinalen Atomstrahl-Spinecho-Experiments. Erläuterungen siehe Text.

ten Spezialfalls des LABSE<sup>1</sup> zeigt, was eine entsprechende Theorie leisten muss, nämlich die quantenmechanische Beschreibung des Atoms als Wellenpaket unter dem Einfluss der durch die elektrischen und magnetischen Felder erzeugten Potentiale.

Wie in der Einleitung bereits erklärt, befindet sich die gewünschte Feldkonfiguration beim LABSE in der Regel zwischen den sogenannten Spinecho-Feldern, siehe Abb. 2.1b. Dies sind einfach zwei antiparallele Magnetfelder in Strahlrichtung, die dafür sorgen, dass die Wellenpakete aufgrund unterschiedlicher Potentiale im ersten Magnetfeld zunächst auseinander driften und im zweiten Feld wieder zusammengeführt werden, so dass es durch den Überlapp je zweier Teilwellenpakete zu beobachtbaren Interferenzmustern kommt. In Abschnitt 3.3 werden wir all dies an einem einfachen Beispiel genauer erläutern. Zuvor jedoch wollen wir im folgenden Abschnitt 2.2 einen ersten einfachen Ansatz für die Beschreibung eines Atoms in einem matrixwertigen Potential machen. Die Unzulänglichkeiten, die sich bei diesem Ansatz offenbaren werden, machen eine genauere Untersuchung von zunächst eindimensionalen Wellenpaketen in skalaren Potentialen notwendig, die in Abschnitt 2.3 begonnen wird und erst in Kapitel 6 wieder auf den Fall matrixwertiger Potentiale ausgedehnt wird.

## 2.2 Die Charakteristiken-Lösung

### 2.2.1 Eine Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung

Beginnen wir mit einer einfachen, qualitativen Überlegung: Der quantenmechanische Gesamtzustand  $|\Psi(Z, t)\rangle$  des Atoms ist eine Superposition innerer atomarer Zustände<sup>2</sup>. Zusätzlich muss das Atom im Ortsraum als zeitabhängige Wellenfunktion beschrieben werden, also von der Koordinate  $Z$  und der Zeit  $t$  abhängen. Insgesamt kann also das Atom als ein verallgemeinerter Spinor geschrieben werden, dessen Komponenten die Wellenfunktionen der inneren, atomaren Zustände sind. Das elektrische und das magnetische Feld führen zur Wechselwirkung der Komponenten-Wellenfunktionen, d.h. das durch die Felder verursachte, ortsabhängige Potential kann in Form einer Matrix  $\mathcal{M}(Z)$  geschrieben werden.

Wir können also eine matrixwertige Schrödinger-Gleichung für den atomaren Gesamtzu-

---

<sup>1</sup>Die Abkürzung ABSE für den englischen Ausdruck *Atomic Beam Spin Echo* ist üblich. Da wir hier nur das longitudinale ABSE untersuchen, verwenden wir in diesem Zusammenhang die Abkürzung LABSE.

<sup>2</sup>Die genauere Spezifizierung dieser inneren atomaren Zustände wollen wir auf einen späteren Zeitpunkt verschieben. In diesem einführenden Abschnitt 2.2 wollen wir uns zunächst ein grobes Bild der zu beschreibenden Situation machen. Der ungeduldige Leser sei bereits auf Anhang A.2 verwiesen, wo entsprechende Grundlagen ausführlich behandelt werden.

---

stand in der Form

$$\left(-\frac{1}{2M}\partial_Z^2 + \underline{\mathcal{M}}(Z)\right) |\Psi(Z, t)\rangle = i\partial_t |\Psi(Z, t)\rangle, \quad (2.1)$$

ansetzen. Wir separieren im atomaren Gesamtzustand eine ebene Welle mit mittlerer Wellenzahl  $\bar{k}$  und Energie  $\bar{\omega}$  ab und schreiben

$$|\Psi(Z, t)\rangle = e^{i(\bar{k}Z - \bar{\omega}t)} |A(Z, t)\rangle. \quad (2.2)$$

Nun nehmen wir an, die Potentialmatrix  $\underline{\mathcal{M}}(Z)$  variere nur langsam mit dem Ort und die zugrundeliegenden Felder seien schwach genug, um nur geringe Unterschiede in den Potentialen der einzelnen atomaren Zustände zu verursachen. Ferner nehmen wir an, wir betrachten nur sehr breite Wellenpakete im Ortsraum. Unter diesen Voraussetzungen wird auch der Amplituden-Spinor  $|A(Z, t)\rangle$  im Ort nur langsam variieren und wir können seine zweite Ortsableitung in der Schrödinger-Gleichung vernachlässigen.

Wir erhalten dann nach Einsetzen von (2.2) in Gl. (2.1)

$$\begin{aligned} (\bar{\omega} + i\partial_t) |A(Z, t)\rangle &= \left[ -\frac{1}{2M} (-\bar{k}^2 + 2i\bar{k}\partial_Z + \partial_Z^2) + \underline{\mathcal{M}}(Z) \right] |A(Z, t)\rangle \\ &\approx \left[ -\frac{1}{2M} (-\bar{k}^2 + 2i\bar{k}\partial_Z) + \underline{\mathcal{M}}(Z) \right] |A(Z, t)\rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

Nun setzen wir  $\bar{\omega} = \bar{k}^2/2M$  und erhalten damit die in der hier gemachten Näherung gültige Schrödinger-Gleichung

$$\left( i\frac{\bar{k}}{M}\partial_Z + i\partial_t - \underline{\mathcal{M}}(Z) \right) |A(Z, t)\rangle = 0 \quad (2.4)$$

für den Amplituden-Spinor  $|A(Z, t)\rangle$ .

Eine Standard-Methode zum Lösen dieser einfachen partiellen Differentialgleichung (DGL) ist die Methode der Charakteristiken (eine gute Darstellung findet sich z.B. in [37], Kap. 8.2). Hierbei führt man eine Variablentransformation durch, die die partielle DGL zweier Variabler in eine gewöhnliche DGL einer Variablen überführt. Wir definieren hier

$$\begin{aligned} \eta &:= \frac{1}{2} \left( t + \frac{M}{\bar{k}} Z \right), \\ \xi &:= \frac{1}{2} \left( t - \frac{M}{\bar{k}} Z \right). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Damit gilt die Rücktransformation

$$\begin{aligned} t &= \eta + \xi, \\ Z &= \frac{\bar{k}}{M}(\eta - \xi), \end{aligned} \quad (2.6)$$

und die Differentialoperatoren lauten

$$\partial_Z = \frac{\partial \eta}{\partial Z} \partial_\eta + \frac{\partial \xi}{\partial Z} \partial_\xi = \frac{m}{2k} (\partial_\eta - \partial_\xi) , \quad (2.7)$$

$$\partial_t = \frac{\partial \eta}{\partial t} \partial_\eta + \frac{\partial \xi}{\partial t} \partial_\xi = \frac{1}{2} (\partial_\eta + \partial_\xi) , \quad (2.8)$$

und somit können wir Gl. (2.4) umschreiben in

$$[i\partial_\eta - \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta, \xi))] |A(Z(\eta, \xi), t(\eta, \xi))\rangle = 0 \quad (2.9)$$

Mit der Definition  $|B(\eta, \xi)\rangle := |A(Z(\eta, \xi), t(\eta, \xi))\rangle$  erhalten wir die Gleichung

$$[i\partial_\eta - \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta, \xi))] |B(\eta, \xi)\rangle = 0 , \quad (2.10)$$

deren Lösung

$$|B(\eta, \xi)\rangle = \mathcal{P} \exp \left\{ -i \int_{\eta_0}^{\eta} d\eta' \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta', \xi)) \right\} |B(\eta_0, \xi)\rangle , \quad (\eta \geq \eta_0)$$

lautet. Die Einschränkung  $\eta > \eta_0$  ist wichtig, da die Pfadordnung, die hier bzgl. der Integrationsvariable  $\eta'$  zu nehmen ist, ansonsten die Operatoren  $\underline{\mathcal{M}}(Z(\eta', \xi))$  in die verkehrte Reihenfolge bringen würde<sup>3</sup>. Dieses Problem umgeht man mit einer Parametrisierung des Weges von  $\eta_0$  nach  $\eta$ :

$$\eta'(\varrho) = (1 - \varrho)\eta_0 + \varrho\eta, \quad (0 \leq \varrho \leq 1) . \quad (2.11)$$

Dann wird nämlich

$$d\eta' = (\eta - \eta_0) d\varrho \quad (2.12)$$

und die Lösung kann nun für beliebige Werte von  $\eta$  geschrieben werden als

$$|B(\eta, \xi)\rangle = \mathcal{P} \exp \left\{ -i \int_0^1 d\varrho (\eta - \eta_0) \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta'(\varrho), \xi)) \right\} |B(\eta_0, \xi)\rangle \quad (2.13)$$

Dabei steht  $\mathcal{P}$  für die Pfadordnung/Zeitordnung bzgl. des Parameters  $\varrho$ . Im Argument der Matrix  $\underline{\mathcal{M}}(Z(\eta'(\varrho), \xi))$  ist  $Z$  gemäß der Transformationsvorschrift (2.6) und  $\eta'(\varrho)$  aus (2.12) einzusetzen. Betrachtet man Gl. (2.13) genauer, so erkennt man, dass der Operator

$$\underline{\mathcal{V}}(\eta, \eta_0; \xi) |B(\eta_0, \xi)\rangle := \mathcal{P} \exp \left\{ -i \int_0^1 d\varrho (\eta - \eta_0) \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta'(\varrho), \xi)) \right\} \quad (2.14)$$

den Zustand  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  mit dem Zustand  $|B(\eta, \xi)\rangle$  verbindet, und zwar entlang einer Linie mit konstantem  $\xi$ . Der Operator  $\underline{\mathcal{V}}(\eta, \eta_0; \xi) |B(\eta_0, \xi)\rangle$  ist ein Konnektor (siehe z.B. [38], Gl. (2.23 f.)) mit den folgenden Eigenschaften:

---

<sup>3</sup>Der Pfad wird stets von  $\eta_0 \rightarrow \eta$  durchlaufen, die Pfadordnung würde für  $\eta < \eta_0$  die Operatoren jedoch so anordnen, also würde der Pfad von  $\eta \rightarrow \eta_0$  durchlaufen werden.



- **Neutrales Element:** Der Konnektor entlang eines geschlossenen Pfades ist gleich dem Einheitsoperator:

$$\underline{\mathcal{V}}(\eta, \eta; \xi) = \mathbb{1} . \quad (2.15)$$

- **Inverser Konnektor:** Den inversen Konnektor erhält man durch Vertauschen von Anfangs- und Endpunkt und dem rückwärts durchlaufenen Pfad, d.h. hier: bei festem  $\xi$  sind die Integrationsgrenzen zu vertauschen:

$$\underline{\mathcal{V}}(\eta_2, \eta_1; \xi) \underline{\mathcal{V}}(\eta_1, \eta_2; \xi) = \mathbb{1} . \quad (2.16)$$

- **Produkt von Konnektoren:** Das Produkt zweier Konnektoren für zwei verbundene Pfade entspricht dem Konnektor über den gesamten Pfad, d.h. hier bei festem  $\xi$  gilt:

$$\underline{\mathcal{V}}(\eta_3, \eta_2; \xi) \underline{\mathcal{V}}(\eta_2, \eta_1; \xi) = \underline{\mathcal{V}}(\eta_3, \eta_1; \xi) \quad (2.17)$$

## 2.2.2 Eigenschaften der Charakteristiken-Lösung

### Anfangsbedingungen

Ein Problem der Lösung aus Gl. (2.13) sind die Anfangsbedingungen. Ausgehend von einem Amplituden-Spinor  $|A(Z, t = t_0)\rangle$  zur Zeit  $t_0$  interessiert man sich für den Amplituden-Spinor zu einer Zeit  $t > t_0$ . Das  $\eta$ - $\xi$ -Koordinatensystem, in dem die Lösung (2.13) lebt, ist aber relativ zum  $Z$ - $t$ -Koordinatensystem gedreht (da sowohl  $\eta$  als auch  $\xi$  lineare Funktionen in  $Z$  und  $t$  sind). Um eine anschauliche Lösung zu erhalten, müssen wir Gl. (2.13) in die ursprünglichen Koordinaten  $(Z, t)$  zurücktransformieren. Dazu verwenden wir die Eigenschaften der eben eingeführten Konnektoren.

Mit Hilfe der Transformationsvorschrift (2.5) identifizieren wir

$$|A(Z, t_0)\rangle = |B(\eta(Z, t_0), \xi(Z, t_0))\rangle = |B(\tfrac{1}{2}(t_0 + \tfrac{M}{k}Z), \tfrac{1}{2}(t_0 - \tfrac{M}{k}Z))\rangle . \quad (2.18)$$

Nun setzen wir auf der rechten Seite die Lösung (2.13) ein und erhalten für beliebiges  $\eta_0$

$$|A(Z, t_0)\rangle = \underline{\mathcal{V}}(\tfrac{1}{2}(t_0 + \tfrac{M}{k}Z), \eta_0; \xi) |B(\eta_0, \xi)\rangle \quad (2.19)$$

mit

$$\xi = \tfrac{1}{2}(t_0 - \tfrac{M}{k}Z) . \quad (2.20)$$

Wir können nun die Lösung zu einer späteren Zeit  $t$  durch erneutes Anwenden eines Konnektors erhalten. Dabei müssen wir allerdings beachten, dass der Konnektor nur Punkte entlang Linien mit konstantem  $\xi$  verbindet. Gemäß

$$\xi = \tfrac{1}{2}(t - \tfrac{M}{k}Z') \stackrel{(2.20)}{=} \tfrac{1}{2}(t_0 - \tfrac{M}{k}Z) \quad (2.21)$$

gelangen wir also im  $Z$ - $t$ -Koordinatensystem auch zu einem anderen Ort  $Z'$ . Anhand von Gl. (2.21) können wir in Verbindung mit der Definition von  $\xi(Z, t)$  und  $\eta(Z, t)$  aus Gl. (2.5) den Wert von  $\eta$  bestimmen, für den wir den Konnektor benötigen. Es folgt

$$|A(Z', t)\rangle = |B(\eta(Z', t), \xi(Z', t))\rangle = \underline{\mathcal{V}}(\tfrac{1}{2}(t + \tfrac{M}{k}Z'), \eta_0; \xi) |B(\eta_0, \xi)\rangle . \quad (2.22)$$

Um die Verbindung zwischen dem Anfangswert  $|A(Z, t_0)\rangle$  und  $|A(Z', t)\rangle$  herzustellen, lösen wir (2.19) nach  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  auf und setzen das Ergebnis in (2.22) ein. Es folgt

$$|A(Z', t)\rangle = \underline{\mathcal{V}}(\tfrac{1}{2}(t + \tfrac{M}{k}Z'), \eta_0; \xi) \underline{\mathcal{V}}^{-1}(\tfrac{1}{2}(t_0 + \tfrac{M}{k}Z), \eta_0; \xi) |A(Z, t_0)\rangle . \quad (2.23)$$

Mit Hilfe der Relationen (2.16) und (2.17)

$$|A(Z', t)\rangle = \underline{\mathcal{V}}(\tfrac{1}{2}(t + \tfrac{M}{k}Z'), \tfrac{1}{2}(t_0 + \tfrac{M}{k}Z); \xi) |A(Z, t_0)\rangle . \quad (2.24)$$

Die beiden Werte  $Z$  und  $Z'$  hängen über Gl. (2.21) voneinander ab. Wir ersetzen daher

$$Z = Z' - \tfrac{\bar{k}}{M}(t - t_0) \quad (2.25)$$

und erhalten

$$|A(Z', t)\rangle = \underline{\mathcal{V}}(\tfrac{1}{2}(t + \tfrac{M}{k}Z'), t_0 - \tfrac{1}{2}(t - \tfrac{M}{k}Z'); \xi) |A(Z' - \tfrac{\bar{k}}{M}(t - t_0), t_0)\rangle . \quad (2.26)$$

Setzen wir die explizite Darstellung des Konnektors aus (2.13) ein, so folgt schließlich nach Umbenennung von  $Z'$  in  $Z$

$$|A(Z, t)\rangle = \mathcal{P} \exp \left\{ -i \int_0^1 d\varrho (t - t_0) \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta'(\varrho), \xi)) \right\} |A(Z - \tfrac{\bar{k}}{M}(t - t_0), t_0)\rangle \quad (2.27)$$

mit  $\eta'(\varrho)$  aus (2.11), sowie  $\eta$  und  $\xi$  aus (2.5).

Wir können im pfadgeordneten Integral die Substitution  $Z' = \tfrac{\bar{k}}{M}(\eta' - \xi)$  durchführen (siehe (2.6)), was wegen  $\xi = \text{const}$  zu  $d\eta' = \tfrac{M}{\bar{k}} dZ'$  führt. Wegen (2.11) und (2.26) folgt damit  $d\eta' = (t - t_0) d\varrho = \tfrac{M}{k} dZ'$  und somit  $Z'(\varrho) = \tfrac{M}{\bar{k}}(t - t_0)\varrho + Z'_0$ . Mit  $Z'(1) = Z$  und  $Z'(0) = Z'_0 = Z - \tfrac{\bar{k}}{M}(t - t_0)$  erhalten wir schließlich

$$|A(Z, t)\rangle = \mathcal{P} \exp \left\{ -i \frac{M}{\bar{k}} \int_{Z - \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0)}^Z dZ' \underline{\mathcal{M}}(Z') \right\} |\tilde{\varphi} \left( Z - \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0) \right)\rangle , \quad (t \geq t_0) .$$

(2.28)

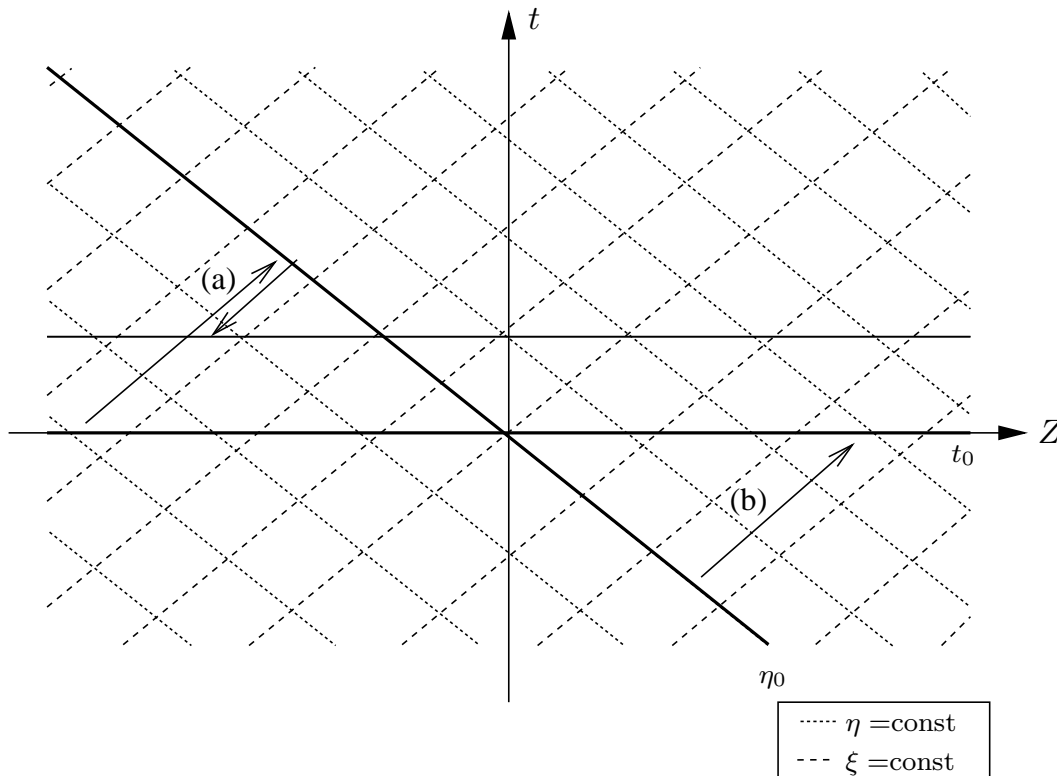
Wir haben hier eine Umbenennung  $|\tilde{\varphi} \left( Z - \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0) \right)\rangle = |A(Z - \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0), t_0)\rangle$  durchgeführt, um Vergleiche mit den Ergebnissen der Rechnungen in den folgenden Kapiteln zu erleichtern. Die Einschränkung  $t \geq t_0$  ist wieder notwendig, damit die Pfadordnung das richtige Ergebnis liefert (siehe Fußnote 3 auf Seite 10).

### Grafische Veranschaulichung der Charakteristiken-Lösung

Wir wollen nun die eben gemachte Rechnung und Vorgehensweise grafisch veranschaulichen. Zunächst betrachten wir Gl. (2.19). In der grafischen Interpretation entspricht diese Gleichung der Verbindung eines Punktes  $(\eta_0, \xi)$  mit  $(z(\eta, \xi), t_0(\eta, \xi))$  über den Konnektor, angedeutet durch den Pfeil (b) in Abb. 2.2. Der Wert  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  wird durch (2.19) auf den Wert  $|A(Z, t_0)\rangle$  abgebildet.

Stellen wir die Gleichung nach  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  um, so kehrt der Pfeil seine Richtung um, d.h. es wird der Anfangswert  $|A(Z, t_0)\rangle$  mit dem Wert  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  verbunden. Da wir aber an  $|A(Z', t)\rangle$  zu einer festen Zeit  $t$  interessiert sind, muss der Wert  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  erneut mit  $|A(Z', t)\rangle$  verbunden werden. Dies ist mit den beiden Pfeilen (a) auf der linken Seite von Abb. 2.2 angedeutet und entspricht Gl. (2.23).

Die beiden Konnektoren, die je zwei Funktionswerte entlang desselben Pfades verbinden, lassen sich schließlich zu einem einzigen Konnektor zusammenfassen, so dass am Ende nur die Verbindung von  $|A(Z, t_0)\rangle$  mit  $|A(Z', t)\rangle$  verbleibt.



**Abbildung 2.2:** Geometrische Veranschaulichung der Problematik des Anfangswertproblems. Die Bewegungsgleichung für das Wellenpaket wurde in den neuen Koordinaten  $(\eta, \xi)$  gelöst. Die gestrichelten Linien sind die Linien mit jeweils konstantem  $\eta$  bzw.  $\xi$ .

### Direkte Implementation der Anfangsbedingungen

Motiviert von dieser grafischen Veranschaulichung wollen wir nun versuchen, den direkten Weg von  $|A(Z, t_0)\rangle$  zu  $|A(Z', t)\rangle$  gehen. Dazu setzen wir bei der Differentialgleichung (2.9) an, deren Lösung (mit korrekter Parametrisierung des Pfades, s. Gl. (2.11))

$$|A(Z(\eta, \xi), t(\eta, \xi))\rangle = \mathcal{P} \exp \left\{ -i \int_0^1 d\varrho (\eta - \eta_0) \underline{\mathcal{M}}(Z(\eta'(\varrho), \xi)) \right\} \times |A(Z(\eta_0, \xi), t(\eta_0, \xi))\rangle \quad (2.29)$$

lautet. Gemäß Abb. 2.2 wird der Wert des Amplituden-Spinors an einer Stelle  $(Z_0, t_0)$  entlang der Linie mit festem  $\xi$  mit dem Wert  $|A(Z, t)\rangle$  über das pfadgeordnete Integral (Konnektor) verbunden. Interessiert man sich nun für den Wert  $|A(Z, t)\rangle$ , so legt dies eindeutig den Wert von  $\xi$  fest, s. Gl. (2.5). Bei gegebener Anfangszeit  $t_0$  kann man damit auf die ursprüngliche Stelle  $Z_0$  schließen, mit dem der Punkt  $(Z, t)$  verbunden ist. Es gilt

$$\xi \stackrel{(2.5)}{=} \frac{1}{2} \left( t - \frac{M}{k} Z \right) = \frac{1}{2} \left( t_0 - \frac{M}{k} Z_0 \right) \quad (2.30)$$

und somit

$$Z(t - t_0, Z_0) = \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0) + Z_0, \quad Z_0(t - t_0, Z) = Z - \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0). \quad (2.31)$$

Im Konnektor werden die Anfangs- und Endwerte  $\eta_0, \eta$  für die betrachteten Punkte  $(Z_0, t_0)$ ,  $(Z, t)$  benötigt. Es gilt nach (2.5):

$$\begin{aligned} \eta_0 &= \frac{1}{2} \left( t_0 + \frac{M}{k} Z_0 \right) = \frac{1}{2} \left( 2t_0 - t + \frac{M}{k} Z \right) = t_0 - \xi, \\ \eta &= \frac{1}{2} \left( t + \frac{M}{k} Z \right), \quad \eta - \eta_0 = t - t_0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Nach (2.6) gilt außerdem

$$Z(\eta_0, \xi) = \frac{\bar{k}}{M}(\eta_0 - \xi) \stackrel{(2.30), (2.32)}{=} Z_0, \quad t(\eta_0, \xi) = \eta_0 + \xi = t_0. \quad (2.33)$$

Damit lautet die Lösung (2.29)

$$|A(Z, t)\rangle = \mathcal{P} \exp \left\{ -i \int_0^1 d\varrho (t - t_0) \underline{\mathcal{M}}\left(\frac{\bar{k}}{M}(\eta'(\varrho) - \xi)\right) \right\} |A(Z_0, t_0)\rangle. \quad (2.34)$$

Dieses Ergebnis ist, nach Einsetzen von  $Z_0$  aus (2.31), völlig identisch mit (2.27) und somit äquivalent zu (2.28). Wir haben es hier jedoch ohne die Verwendung der Zwischenfunktion  $|B(\eta_0, \xi)\rangle$  erhalten.

---

### Abschließende Bemerkungen zur Charakteristiken-Lösung

Eine interessante Eigenschaft der Lösung (2.34) sieht man im adiabatischen Grenzfall. Dann ist die Potentialmatrix  $\mathcal{M}(Z)$  diagonal, die Pfadordnung entfällt und es treten keinerlei Mischungen zwischen Wellenpaketen unterschiedlicher Zustände auf. Jedes Wellenpaket bekommt dann gemäß der Lösung einen dynamischen Phasenfaktor. Da die Wellenpakete nur von einer einzigen, orts- und zeitabhängigen Funktion  $Z_0(Z, t) = Z - \frac{\bar{k}}{M}(t - t_0)$  abhängen, gibt es keine Dispersion. Desweiteren ist die Geschwindigkeit der Wellenpakete mit  $\bar{v} = \bar{k}/M$  auch in den Potentialen stets konstant.

Offenbar hat also die Verwendung des sehr einfachen Ansatzes (2.2) mit dem Phasenwinkel einer ebenen Welle in Verbindung mit der Vernachlässigung der zweiten Ortsableitung des Amplituden-Spinors zu einer sehr eingeschränkt gültigen Näherungslösung geführt. Dies soll uns als Motivation dienen, nach besseren Lösungsverfahren der matrixwertigen Schrödinger-Gleichung zu suchen. Insbesondere wollen wir im folgenden Abschnitt 2.3 zunächst eine verbesserte Näherung für ein eindimensionales Wellenpaket in einem reellen Potential untersuchen. Erst nachdem wir diese Näherungslösung eingehend studiert haben, kommen wir in Kap. 5 zunächst zu komplexen, skalaren Potentialen und in Kap. 6 dann schließlich wieder zurück zu matrixwertigen Potentialen.

## 2.3 Die WKB-Lösung

Ab sofort betrachten wir nur stationäre, reelle, skalare Potentiale die von einer Ortskoordinate  $z$  abhängen. Erst in Kapitel 5 werden wir zu komplex-skalaren Potentialen und in Kapitel 6 dann schließlich zu allgemeinen Matrixpotentialen übergehen. Die im vorangegangenen Abschnitt 2.2 verwendeten Spinoren  $|\Psi(Z, t)\rangle$  und  $|A(Z, t)\rangle$  werden nun also durch skalare Funktion  $\Psi(z, t)$  und  $A(z, t)$  ersetzt. Da die quantenmechanischen Überlegungen der folgenden Kapitel allgemeinerer Natur sind und sich nicht mehr direkt auf die Beschreibung eines Atoms beziehen, schreiben wir anstelle der Gesamtmasse  $M$  des Atoms und seiner Schwerpunktskoordinate  $Z$  nun allgemeiner  $m$  für die Masse des durch die Wellenfunktion repräsentierten Teilchens und  $z$  für die Ortskoordinate.

### 2.3.1 Eine verbesserte Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung

Macht man in der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung (mit reellem, skalaren Potential  $V(z)$ ),

$$(\partial_z^2 - 2mV(z) + 2mi\partial_t) \Psi(z, t) = 0 , \quad (2.35)$$

den allgemeinen Ansatz

$$\Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} A(z, t) , \quad (2.36)$$

so erhält man nach Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung

$$0 = (i\partial_z^2 \phi(z, t) - (\partial_z \phi(z, t))^2 - 2mV(z) - 2m\partial_t \phi(z, t)) A(z, t) + 2i(\partial_z \phi(z, t))(\partial_z A(z, t)) + \partial_z^2 A(z, t) + 2mi\partial_t A(z, t) . \quad (2.37)$$

Vernachlässigt man nun generell alle zweiten Ortsableitungen, d.h.

$$\partial_z^2 \phi(z, t) \approx 0, \quad \partial_z^2 A(z, t) \approx 0 , \quad (2.38)$$

und betrachtet weiterhin nur Lösungen, die der Forderung

$$(\partial_z \phi(z, t))^2 + 2mV(z) + 2m\partial_t \phi(z, t) = 0 \quad (2.39)$$

genügen, so muss für die Amplitudenfunktion  $A(z, t)$  die Gleichung

$$\frac{1}{m} (\partial_z \phi(z, t)) (\partial_z A(z, t)) + \partial_t A(z, t) = 0 \quad (2.40)$$

gelten.

Die Gleichung (2.39) für den Phasenwinkel  $\phi(z, t)$  wird gelöst von

$$\phi_{\pm}(z, t) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t \pm \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} , \quad (2.41)$$

wobei  $\bar{k}$  die mittlere Wellenzahl des betrachteten Teilchens ist. Die Gesamtenergie des Teilchens, die im potentialfreien Fall identisch mit der kinetischen Energie ist, lautet demzufolge

$$E_{\text{ges}} = \frac{\bar{k}^2}{2m} . \quad (2.42)$$

Wir wählen hier die Lösung  $\phi_+(z, t)$ , die dem Phasenwinkel einer bei fortschreitender Zeit in positive  $z$ -Richtung laufenden ebenen Welle entspricht. Im Folgenden sei also

$$\phi(z, t) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} . \quad (2.43)$$

Setzen wir dies in die Gl. (2.40) für die Amplitudenfunktion ein, so folgt

$$\frac{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z)}}{m} \partial_z A(z, t) + \partial_t A(z, t) = 0 , \quad (2.44)$$

was von jeder Funktion  $A(z, t) = \varphi(\zeta(z) - \tau(t))$  erfüllt wird, sofern man die neuen Koordinaten  $\zeta(z)$  und  $\tau(t)$  definiert als

$$\boxed{\zeta(z) := \int_{z_0}^z dz' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} , \quad \tau(t) := \frac{\bar{k}}{m} t} . \quad (2.45)$$

Insgesamt lautet die Wellenfunktion also nach Einsetzen aller Größen

$$\Psi(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) . \quad (2.46)$$

Der im Phasenwinkel von Gl. (2.46) enthaltene Anteil

$$S_{\bar{k}}(z) := \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \quad (2.47)$$

entspricht dem Phasenwinkel der WKB-Näherung. Die WKB-Methode (siehe z.B. [39], Bd. 1, Kap. 6.2) liefert eine semiklassische Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung in dem Sinne, dass  $\hbar$  als kleiner Parameter betrachtet wird, nach dem die Wellenfunktion entwickelt wird und Beiträge der Ordnung  $\mathcal{O}(\hbar^2)$  vernachlässigt werden. Für eine stationäre, ebene Welle mit Wellenzahl  $k$  erhält man dann die Lösung

$$\psi_k^{\text{WKB}}(z) = A_k^{\text{WKB}}(z) \exp \{ i S_k(z) \} , \quad (2.48)$$

mit  $S_k(z)$  wie in (2.47) und

$$A_k^{\text{WKB}}(z) = \frac{C}{\sqrt{\partial_z S_k(z)}} . \quad (2.49)$$

Es zeigt sich, dass diese Lösung genau dann eine gute Näherung ist, wenn

$$\frac{|m \partial_z V(z)|}{|(k^2 - 2mV(z))|^{3/2}} \ll 1 \quad (2.50)$$

erfüllt ist, d.h. die Änderung des Potentials auf der Skala der lokalen Wellenlänge muss vernachlässigbar klein sein.

In einem Atomstrahl-Spinocho-Experiment wie wir es in der vorliegenden Arbeit betrachten wollen, muss diese Näherung nicht unbedingt erfüllt sein, insbesondere wenn nicht-adiabatische Übergänge berücksichtigt werden müssen. Zunächst wollen wir aber

annehmen, die WKB-Näherung sei erfüllt und Korrekturen zur Näherungslösung später untersuchen.

Eine Näherung, die bei IABSE-Experimenten in der Regel sehr gut erfüllt ist, ist die, dass das Potential  $V(z)$  sehr viel kleiner als die Gesamtenergie (2.42) des Teilchens ist (siehe [13], Abschnitt 3.3.1, S. 53). Tatsächlich gilt etwa

$$\frac{V(z)}{E_{\text{ges}}} = \frac{2mV(z)}{\bar{k}^2} \approx 10^{-5} . \quad (2.51)$$

In diesem Fall wird sich die lokale Wellenzahl, definiert durch

$$k(z) := \partial_z S_{\bar{k}}(z) = \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z)} \quad (2.52)$$

nur wenig ändern und man kann für die WKB-Amplitude

$$A_k^{\text{WKB}}(z) \approx 1 \quad (2.53)$$

annehmen. Aus den WKB-Wellen (2.48) mit Amplitude  $A_k^{\text{WKB}}(z) \approx 1$  wollen wir nun ein Wellenpaket superponieren. Es sei also

$$\Psi(z, t) = \int dk \tilde{\Psi}(k - \bar{k}) \psi_k(z, t) , \quad (2.54)$$

wobei die Amplitudenfunktion  $\tilde{\Psi}(k - \bar{k})$  bei Null ein stark ausgeprägtes Maximum haben soll, d.h.  $\bar{k}$  ist der mittlere Impuls des freien Wellenpakets.

Mit der Näherung (2.53) und der Substitution  $k' = k - \bar{k}$  folgt weiter

$$\Psi(z, t) = \int dk' \tilde{\Psi}(k') \exp \left\{ -i \frac{(\bar{k} + k')^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{(\bar{k} + k')^2 - 2mV(z')} \right\} . \quad (2.55)$$

In der Entwicklung

$$(\bar{k} + k')^2 = \bar{k}^2 + 2k'\bar{k} + k'^2 \approx \bar{k}^2 + 2k'\bar{k} . \quad (2.56)$$

ist die Vernachlässigung von  $k'^2$  gerechtfertigt durch die geforderte, starke Lokalisierung von  $\tilde{\Psi}(k)$  um Null, d.h.  $|k'/\bar{k}| \ll 1$ . Wir können also schreiben

$$\begin{aligned} \Psi(z, t) = & \int dk' \tilde{\Psi}(k') \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t - i \frac{k'\bar{k}}{m} t \right\} \\ & \times \exp \left\{ i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} + 2k'\bar{k} \right\} \end{aligned} \quad (2.57)$$


---



und erhalten mit

$$\begin{aligned}\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z') + 2k'\bar{k}} &= \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \left(1 + \frac{2k'\bar{k}}{\bar{k}^2 - 2mV(z')}\right)^{1/2} \\ &\approx \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \left(1 + \frac{k'\bar{k}}{\bar{k}^2 - 2mV(z')}\right)\end{aligned}\quad (2.58)$$

die Wellenfunktion

$$\begin{aligned}\Psi(z, t) &= \int dk' \tilde{\Psi}(k') \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t - i \frac{k'\bar{k}}{m} t \right\} \\ &\times \exp \left\{ i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} + i \frac{k'\bar{k}}{m} \int_{z_0}^z dz' \frac{m}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} \right\} .\end{aligned}\quad (2.59)$$

Wir können nun den von  $k'$  unabhängigen Anteil aus dem Integral herausziehen und erhalten schließlich

$$\begin{aligned}\Psi(z, t) &= \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \\ &\times \int dk' \tilde{\Psi}(k') \exp \left\{ -i \frac{k'\bar{k}}{m} \left( t - \int_{z_0}^z dz' \frac{m}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} \right) \right\} .\end{aligned}\quad (2.60)$$

Der Phasenfaktor vor dem Integral ist bereits identisch mit dem Phasenfaktor aus (2.46). Das Integral selbst ist eine Fouriertransformation der Funktion  $\tilde{\Psi}(k')$  an der Stelle

$$\zeta(z) - \tau(t) = \frac{\bar{k}}{m} \left( \int_{z_0}^z dz' \frac{m}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} - t \right) , \quad (2.61)$$

in der wir die bereits in (2.45) definierten Funktionen  $\zeta(z)$  und  $\tau(t)$  wiedererkennen. Die Fouriertransformierte von  $\tilde{\Psi}(k')$  wollen wir mit dem Buchstaben  $\varphi$  bezeichnen, d.h. wir erhalten hier die Amplitudenfunktion

$$\varphi(\zeta(z) - \tau(t)) := \int dk' \tilde{\Psi}(k') e^{ik'(\zeta(z) - \tau(t))}$$

(2.62)

und für die gesamte Wellenfunktion den Ausdruck

$$\Psi(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) .$$

(2.63)

Dieses Ergebnis stimmt mit Gl. (2.46) überein und zeigt somit, dass die Bezeichnung dieser Wellenfunktion als WKB-Lösung gerechtfertigt ist, denn wir haben hier WKB-Wellen superponiert. Wir wollen zum Abschluss dieses Abschnitts noch einmal alle Näherungen auflisten, die wir bei der Herleitung der Lösung (2.63) gemacht haben:

W1) WKB-Näherung (2.50),

W2)  $E_{\text{ges}} = \frac{\bar{k}^2}{2m} \gg V(z)$ , d.h.  $A_k^{\text{WKB}}(z) \approx 1$ ,

W3)  $\bar{k} \gg \Delta k$ , wobei  $\Delta k$  die Breite der Fouriertransformierten  $\tilde{\Psi}(k)$  der Amplitudenfunktion  $\varphi(\zeta)$  im Impulsraum sein soll.

### 2.3.2 Eigenschaften der WKB-Lösung

#### Anfangsbedingungen

Die Anfangsbedingungen für die Wellenfunktion (2.63) sind leicht zu implementieren. Zur Zeit  $t = 0$  wird nämlich

$$\Psi(z, t = 0) = \exp \left\{ i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \varphi(\zeta(z)) . \quad (2.64)$$

Wir können o.B.d.A. stets davon ausgehen, dass die Amplitudenfunktion  $\varphi(\zeta)$  um  $\zeta = 0$  zentriert ist. Somit ist nach Definition von  $\zeta(z)$  die Amplitudenfunktion  $\varphi(\zeta(z))$  im Ortsraum um die in  $\zeta(z)$  vorkommende Integrationsuntergrenze  $z_0$  zentriert. Wählt man  $z_0$  so, dass das Anfangswellenpaket vollständig im potentialfreien Bereich lokalisiert ist<sup>4</sup>, so kann man, wegen  $k(z) = \bar{k}$  für  $\varphi(\zeta(z)) \neq 0$ , vereinfachend  $\zeta(z)$  durch  $z - z_0$  ersetzen und erhält

$$\Psi(z, t = 0) = \exp \{ i \bar{k} (z - z_0) \} \varphi(z - z_0) . \quad (2.65)$$

Hier kann man nun leicht die gewünschte Einhüllende  $\varphi(z - z_0)$  des Anfangswellenpakets im Ortsraum festlegen.

#### Gaußsches Wellenpaket

Wählen wir z.B. als Anfangsbedingung ein um  $z_0$  zentriertes Wellenpaket mit Wellenzahl  $\bar{k}$ , d.h.

$$\Psi(z, t_0 = 0) = \mathcal{N}(\sigma) \exp \left\{ i \bar{k} (z - z_0) - \frac{(z - z_0)^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (2.66)$$

---

<sup>4</sup> Diese Annahme wird uns im weiteren Verlauf der Arbeit noch sehr häufig begegnen.

mit

$$\mathcal{N}(\sigma) = (\sigma\sqrt{\pi})^{-1/2} , \quad (2.67)$$

so ist die Einhüllende gemäß (2.65) gegeben durch

$$\varphi(z - z_0) = (\sigma\sqrt{\pi})^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma^2} \right\} . \quad (2.68)$$

Die Breite<sup>5</sup>  $2\sigma$  und  $z_0$  seien so gewählt, dass das Potential  $V(z)$  über die gesamte Ausdehnung des Wellenpakets als Null angesehen werden kann, siehe Abb. 2.3.

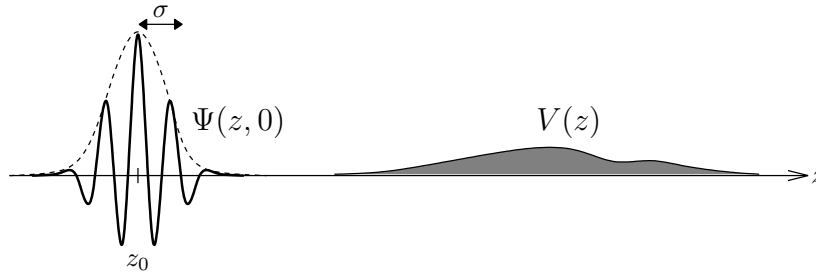


Abbildung 2.3: Das Gaußsche Wellenpaket zur Zeit  $t = 0$ .

Unter diesen Voraussetzungen gilt nach (2.62)

$$\varphi(z - z_0) = \mathcal{N}(\sigma) \exp \left\{ \frac{(z-z_0)^2}{2\sigma^2} \right\} = \int dk' \tilde{\Psi}(k') \exp \{ik'(z - z_0)\} \quad (2.69)$$

und daher mit  $z' = z - z_0$

$$\tilde{\Psi}(k') = \frac{\mathcal{N}(\sigma)}{2\pi} \int dz' \exp \left\{ -\frac{z'^2}{2\sigma^2} \right\} \exp \{-ik'z'\} = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{N}(\sigma) \exp \left\{ -\frac{\sigma^2}{2} k'^2 \right\} . \quad (2.70)$$

Die Breite des Gaußschen Wellenpaketes im Impulsraum ist also  $2/\sigma$  (vgl.  $2\sigma$  im Ortsraum), d.h. für  $k' = \pm\tilde{\sigma} := \pm 1/\sigma$  ist die Amplitude im Impulsraum auf  $1/\sqrt{e}$  abgefallen. Wir verlangen gemäß der Näherung (2.56)

$$(\bar{k} + k')^2 = \bar{k}^2 + 2k'\bar{k} + k'^2 = \bar{k}^2 \left[ 1 + \frac{2k'}{\bar{k}} + \left( \frac{k'}{\bar{k}} \right)^2 \right] \approx \bar{k}^2 \left[ 1 + \frac{2k'}{\bar{k}} \right] , \quad (2.71)$$

also

$$2 \left| \frac{k'}{\bar{k}} \right| \gg \left| \frac{k'}{\bar{k}} \right|^2 \quad (2.72)$$

---

<sup>5</sup>Wir richten uns bei der Definition des Gaußschen Wellenpakets nach [40], Kap. 1.11.1. Als Breite bezeichnen wir nach den Konventionen von [40] die Breite von  $|\Psi(z, t)|^2$  bzgl. des 1/e-fachen des Maximums.

---

für alle  $k'$ , bei denen  $\tilde{\Psi}(k')$  signifikant von Null verschieden ist. Dies impliziert für die Breite  $\tilde{\sigma} = 1/\sigma$  im Impulsraum

$$2 \gg \frac{\tilde{\sigma}}{\bar{k}} = \frac{1}{\sigma \bar{k}} \quad \Rightarrow \quad \sigma \gg \frac{1}{2\bar{k}} = \frac{\bar{\lambda}}{4\pi} \quad (2.73)$$

Anschaulich heißt dies, dass die Breite des Wellenpakets viel größer sein muss, als die de-Broglie-Wellenlänge der Atome im Strahl. Geht man von einem Strahl atomaren Wasserstoffs mit mittlerer Geschwindigkeit  $\bar{v} = 3500 \text{ m/s}$  aus<sup>6</sup>, so ergibt sich eine de-Broglie-Wellenlänge von etwa  $\bar{\lambda} = 0,11 \text{ nm}$  und folglich muss für die Breite des Wellenpakets in etwa  $\sigma \gg 0,01 \text{ nm} = 0,1 \text{ \AA}$  gelten.

### Dispersionsfreiheit und Schwerpunktsbewegung

Man sieht Gl. (2.63) direkt an, dass die WKB-Lösung dispersionsfrei ist. Die Einhüllende  $\varphi(\zeta(z) - \tau(t))$  hängt effektiv nur von einer einzigen Koordinate ab, die in der WKB-Lösung eine Funktion von Ort und Zeit ist. Mit dem Preis der Dispersionsfreiheit erkaufte man sich aber eine sehr einfach zu verstehende Schwerpunktsbewegung<sup>7</sup>. Hat  $\varphi(\zeta - \tau)$  nämlich ein ausgeprägtes Maximum an der Stelle  $\hat{\zeta}$ , so bewegt dieses sich gemäß

$$\hat{\zeta} = \zeta(\hat{z}(t)) - \tau(t) = \int_{z_0}^{\hat{z}(t)} dz' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} - \frac{\bar{k}}{m}t = \text{const} \quad (2.74)$$

fort, wobei  $\hat{z}(t)$  der Ort des Maximums sei. Die Zeitableitung dieser Gleichung, multipliziert mit  $m/\bar{k}$ ,

$$0 = \frac{m}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z(t))}} \frac{d\hat{z}(t)}{dt} - 1, \quad (2.75)$$

führt auf eine Energie-Erhaltungsgleichung der Form

$$\frac{1}{2}m \left( \frac{d\hat{z}(t)}{dt} \right)^2 + V(\hat{z}(t)) = \frac{\bar{k}^2}{2m}. \quad (2.76)$$

Das Maximum des Wellenpakets bewegt sich also wie ein klassisches Teilchen mit der Gesamtenergie  $\frac{\bar{k}^2}{2m}$  durch das Potential. Dies spiegelt auch den semiklassischen Charakter der WKB-Lösung wider.

---

<sup>6</sup>M. DeKieviet, private Diskussion.

<sup>7</sup>Der Ausdruck Schwerpunktsbewegung für ein dispersionsfreies Wellenpaket ist eigentlich nicht nötig, da ja das gesamte Wellenpaket mit gleicher Geschwindigkeit propagiert. Man kann aber davon ausgehen, dass zumindest im adiabatischen Grenzfall auch der Schwerpunkt eines dispergierenden Wellenpakets in guter Näherung die hier berechnete Bewegung erfährt.

---

Im Vergleich zur Charakteristiken-Lösung (2.28) stellt dies bereits eine enorme Verbesserung dar. Wie am Ende von Abschnitt 2.2.2 bereits angesprochen, bewegt sich der Schwerpunkt des Wellenpakets der Charakteristiken-Lösung (im Fall eines skalaren Potentials) nämlich auch in Potentialen stets mit konstanter Geschwindigkeit  $\bar{v} = \bar{k}/m$ . Diese Geschwindigkeit wird vom WKB-Wellenpaket nur im potentialfreien Raum eingenommen.

Die physikalisch sehr gut motivierte WKB-Lösung soll uns als Ausgangspunkt für die weitere Untersuchung der Theorie des longitudinalen Atomstrahl-Spinochors dienen. Im folgenden Kapitel werden wir einige Anwendung der WKB-Lösung studieren. Neben der Potentialstufe und dem Potentialwall werden wir bereits ein einfaches IABSE-Experiment beschreiben und das sogenannte Fahrplanmodell einführen.



# Kapitel 3

## Anwendungen der WKB-Lösung

### 3.1 Streuung an der Potentialstufe

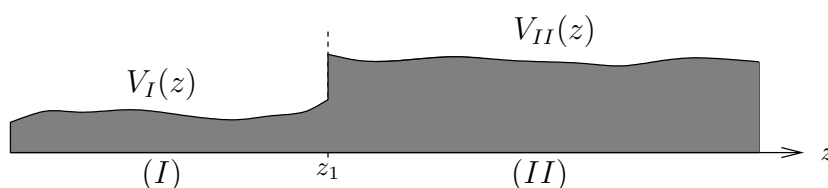
Wir wollen nun einige Anwendungen der WKB-Lösung (2.63) studieren. Wir beginnen mit der Untersuchung des Verhaltens eines WKB-Wellenpakets an einer Potentialstufe, wobei wir immer von den Näherungen (W1)-(W3) auf Seite 20 ausgehen.

#### 3.1.1 Rechnung für ebene WKB-Wellen

Wir betrachten nun eine Potentialstufe der Form

$$V(z) = \Theta(z_1 - z)V_I(z) + \Theta(z - z_1)V_{II}(z) \quad (3.1)$$

mit einem Sprung bei  $z = z_1$ , siehe Abb 3.1.



**Abbildung 3.1:** Allgemeines Potential mit einem Sprung bei  $z = z_1$ .

Um das Verhalten des WKB-Wellenpakets (2.63) an der Potentialstufe zu verstehen, müssen wir zunächst das Verhalten der ebenen WKB-Wellen (2.48), wieder in der Näherung (W2),  $A_k^{\text{WKB}}(z) \approx 1$ , untersuchen. Dann superponieren wir wie im letzten Abschnitt die Lösungen mit festem  $k$  erneut zu einem Wellenpaket.

Den Bereich, in dem  $V(z) = V_I(z)$  ist bezeichnen wir mit  $I$ , den Bereich mit  $V(z) = V_{II}(z)$  bezeichnen wir mit  $II$ . Wir verwenden im Folgenden aus Gründen der Übersichtlichkeit die Abkürzungen

$$U_I(z) = 2mV_I(z) , \quad U_{II}(z) = 2mV_{II}(z) . \quad (3.2)$$

Im Bereich  $I$  setzt sich die Lösung aus einer einlaufenden und einer reflektierten Welle zusammen. Mit der Näherung (W3), siehe Gl. (2.56), folgt

$$\begin{aligned} \psi_{k',I}(z, t) \approx & \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t - i \frac{k' \bar{k}}{m} t \right\} \\ & \times \left[ \exp \left\{ i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \right. \\ & \left. + R(k') \exp \left\{ -i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \right] , \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei wir gemäß (2.56) quadratische Beiträge in  $k'$  vernachlässigt haben. Die Entwicklung der Wurzeln verschieben wir auf später, da die Rechnung dadurch nur unübersichtlich würde. Der reflektierte Anteil erhält vor den Integralen ein zusätzliches Minuszeichen, da es sich hierbei um eine nach links laufende Welle handelt.

Im Bereich  $II$  gibt es nur einen transmittierten Anteil. Hier erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi_{k',II}(z, t) = & S(k') \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t - i \frac{k' \bar{k}}{m} t \right\} \\ & \times \exp \left\{ i \int_{z_1}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z') + 2\bar{k}k'} \right\} . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die Amplitude  $S(k')$  des transmittierten Anteils der Welle ist nicht zu verwechseln mit dem WKB-Anteil des Phasenwinkels  $S_k(z)$ , definiert in (2.47). Die Untergrenze der Integration im Bereich  $II$  wählen wir als  $z_1$ , so dass sich die Integration nur über  $U_{II}$  erstreckt. Gäbe es noch weitere Unstetigkeitsstellen im Potential, so wären die Integrationsgrenzen auf ähnliche Weise zu wählen, so dass niemals über eine Unstetigkeitsstelle integriert wird.

Die im Allgemeinen komplexwertigen Amplituden  $R(k')$  und  $S(k')$  des reflektierten bzw. transmittierten Anteils der Welle berechnen wir aus den Forderungen der Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer ersten Ableitung an der Potentialstufe bei  $z = z_1$ .

---



**Stetigkeit der Wellenfunktion:**  $\psi_{k',I}(z_1, t) \stackrel{!}{=} \psi_{k',II}(z_1, t)$

$$\begin{aligned} S(k') = \exp \left\{ i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \\ + R(k') \exp \left\{ -i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

**Stetigkeit der ersten Ableitung der Wellenfunktion:**  $\partial_z \psi_{k',I}(z_1, t) \stackrel{!}{=} \partial_z \psi_{k',II}(z_1, t)$

$$\begin{aligned} S(k') \sqrt{\frac{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'}} = \left[ \exp \left\{ i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \right. \\ \left. - R(k') \exp \left\{ -i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

Hieraus erhält man

$$\begin{aligned} R(k') &= \frac{\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'} - \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}}{\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'} + \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}} \\ &\quad \times \exp \left\{ 2i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \\ &=: \hat{R}(k') \exp \left\{ 2i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} S(k') &= \frac{2\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'}}{\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'} + \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}} \\ &\quad \times \exp \left\{ i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \\ &=: \hat{S}(k') \exp \left\{ i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\}, \end{aligned} \quad (3.8)$$


---

wobei wir die reellen Amplituden  $\hat{R}(k')$  und  $\hat{S}(k')$  definiert haben. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass für  $R(k')$  und  $S(k')$  die Beziehung

$$\begin{aligned} 1 &= |R(k')|^2 + \sqrt{\frac{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'}} |S(k')|^2 \\ &= |\hat{R}(k')|^2 + \sqrt{\frac{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'}} |\hat{S}(k')|^2, \end{aligned} \quad (3.9)$$

erfüllt ist. Stellt man sich die ebene Welle als Teilchenstrahl vor, so bedeutet (3.9), dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten für die Reflexion und Transmission des Teilchens gleich Eins ist, d.h. ein Teilchen im Strahl wird am Potentialwall stets entweder reflektiert oder transmittiert. In diesem Zusammenhang bezeichnet man  $|\hat{R}(k')|^2$  als Reflexionskoeffizient und

$$T(k') = \sqrt{\frac{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1) + 2\bar{k}k'}{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'}} |\hat{S}(k')|^2 \quad (3.10)$$

als Transmissionskoeffizienten.

### 3.1.2 Anwendungen der Näherung der WKB-Lösung

Die Näherung (W3) von S. 20 bedeutet, dass wir nur breite Wellenpakete  $\Psi(z, t)$  im Ortsraum betrachten wollen, deren Fouriertransformierte  $\tilde{\Psi}(k')$  um eine sehr große Wellenzahl  $\bar{k}$  sehr stark lokalisiert ist, d.h. wir setzen  $|k'/\bar{k}| \ll 1$  für alle signifikant von Null verschiedenen Werte von  $\tilde{\Psi}(k')$  voraus. Wir betrachten weiterhin gemäß Näherung (W2) nur sehr kleine Potentiale, verglichen mit der kinetischen Energie (W2), d.h. es gilt weiter  $U(z)/\bar{k}^2 \ll 1$ . Insgesamt wird also

$$\left| \frac{U(z)}{\bar{k}^2} - 2\frac{k'}{\bar{k}} \right| \ll 1 \quad (3.11)$$

für alle Orte  $z$  gelten. Wir können damit die in den Ausdrücken der Reflexions- und Transmissionsamplituden auftretenden Wurzeln wie folgt entwickeln:

$$\begin{aligned} \sqrt{\bar{k}^2 - U(z) + 2\bar{k}k'} &= \bar{k} \sqrt{1 - \left( \frac{U(z)}{\bar{k}^2} - 2\frac{k'}{\bar{k}} \right)} \\ &\approx \bar{k} \left( 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{U(z)}{\bar{k}^2} - 2\frac{k'}{\bar{k}} \right) \right) \\ &= \bar{k}(1 - \varepsilon(z)) + k'. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Hier haben wir die durch

$$\varepsilon(z) := \frac{U(z)}{2\bar{k}^2} \quad (3.13)$$

definierte Hilfsgröße eingeführt, für die stets  $|\varepsilon(z)| \ll 1$  gilt.

Wir werden nun diese Entwicklung in den in (3.7) und (3.8) definierten Amplituden  $\hat{R}(k')$  und  $\hat{S}(k')$  anwenden, die Wurzeln in den Phasenfaktoren aber zunächst unberührt lassen und erst bei der Superposition der ebenen Wellen entwickeln. Für  $\hat{R}(k')$  folgt

$$\hat{R}(k') \approx \frac{\varepsilon_{II}(z_1) - \varepsilon_I(z_1)}{2 + 2k'/\bar{k} - \varepsilon_I(z_1) - \varepsilon_{II}(z_1)} . \quad (3.14)$$

Das reflektierte Wellenpaket ergibt sich im Wesentlichen als Fouriertransformation des Produkts  $\hat{R}(k')\tilde{\Psi}(k')$ . Am Beispiel des Gaußschen Wellenpakets wollen wir uns davon überzeugen, dass bei den hier gemachten Näherungen der Anteil von  $\hat{R}(k')$  bei der Superposition des Wellenpakets als konstant im Vergleich zu  $\tilde{\Psi}(k')$  angesehen werden kann. Setzt man nämlich gemäß (2.70)  $\tilde{\Psi}(k') = \sigma N(\sigma) \exp(-\sigma^2 k'^2/2)$ , wobei nach (2.73)  $\sigma^2 \gg \bar{k}^{-2}$  erfüllt ist, so führt die Entwicklung der Amplitude  $\hat{R}(k')$  nach der kleinen Größe  $k'/\bar{k}$ ,

$$\hat{R}(k')f(k') \propto \left(1 - \frac{k'}{\bar{k}} + \mathcal{O}((k'/\bar{k})^2)\right) \exp\left\{-\sigma^2 k'^2/2\right\} \quad (3.15)$$

auf das folgende Ergebnis: Das Argument  $\sigma^2 k'^2/2$  der Gauß-Funktion wächst betragsmäßig im Vergleich zu  $k'/\bar{k}$  sehr schnell an. Dies bedeutet, die Gauß-Funktion schneidet für  $|k'| > 0$  die Entwicklung von  $\hat{R}(k')$  nach  $k'/\bar{k}$  schnell ab. Auf der anderen Seite geht für  $k'/\bar{k} \rightarrow 0$  die Gaußfunktion gegen Eins und  $\hat{R}(k')$  kann durch  $\hat{R}(0)$  approximiert werden. Somit kann die Abhängigkeit von  $k'$  in  $\hat{R}(k')$  gegenüber der Abhängigkeit von  $k'$  in  $\tilde{\Psi}(k')$  in guter Näherung ganz vernachlässigt werden und wir können uns im Folgenden auf die Betrachtung von  $\hat{R}(0)$  beschränken.

Für  $\hat{S}(k')$  gilt die analoge Überlegung. Die Entwicklung der Wurzeln ergibt

$$\hat{S}(k') \approx \frac{1 - \varepsilon_I(z_1) + k'/\bar{k}}{1 + k'/\bar{k} - \frac{1}{2}(\varepsilon_I(z_1) + \varepsilon_{II}(z_1))} , \quad (3.16)$$

entwickeln wir nun weiter nach  $k'/\bar{k}$ , so folgt

$$\hat{S}(k')f(k') \propto \left(1 + C \frac{k'}{\bar{k}} + \mathcal{O}((k'/\bar{k})^2)\right) \exp\left\{-\sigma^2 k'^2/2\right\} \quad (3.17)$$

mit einer Konstante  $C \approx 1$ . Mit der gleichen Argumentation wie für  $\hat{R}(k')$  können wir uns im Folgenden also auch auf die Betrachtung von  $\hat{S}(0)$  beschränken.

Wir definieren daher

$$\hat{R}_0 := \hat{R}(0) = \frac{\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1)} - \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1)}}{\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1)} + \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1)}} \approx \hat{R}(k') , \quad (3.18)$$

$$\hat{S}_0 := \hat{S}(0) = \frac{2\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1)}}{\sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1)} + \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z_1)}} \approx \hat{S}(k') \quad (3.19)$$

und man sieht sofort, dass auch für die approximierten Amplituden

$$1 + \hat{R}_0 = \hat{S}_0 \quad (3.20)$$

erfüllt ist. Entwickeln wir nun die Wurzeln in  $\hat{R}_0$  und  $\hat{S}_0$  gemäß der Näherung (W2) der kleinen Potentiale bis zur Ordnung  $U/\bar{k}^2$ , so folgt weiter

$$\hat{R}_0 \approx \frac{U_{II}(z_1) - U_I(z_1)}{4\bar{k}^2} , \quad (3.21)$$

$$\hat{S}_0 \approx \left( 1 + \frac{U_{II}(z_1) - U_I(z_1)}{4\bar{k}^2} \right) \quad (3.22)$$

und somit

$$|\hat{R}_0|^2 \approx |R(k')|^2 \approx 0 , \quad |\hat{S}_0|^2 \approx |S(k')|^2 \approx \left( 1 + \frac{U_{II}(z_1) - U_I(z_1)}{2\bar{k}^2} \right) \quad (3.23)$$

In unserer Näherung sollte also der reflektierte Anteil nicht relevant sein. Die Gleichung (3.9) für die Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstroms gilt auch für die Näherungen  $\hat{R}_0$  und  $\hat{S}_0$ , wenn man überall  $k' = 0$  setzt und den Vorfaktor entwickelt:

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{\approx} |\hat{R}_0|^2 + \sqrt{\frac{1 - U_{II}(z_1)/\bar{k}^2}{1 - U_I(z_1)/\bar{k}^2}} |\hat{S}_0|^2 \\ &\approx 0 + \left( 1 - \frac{U_{II}(z_1) - U_I(z_1)}{2\bar{k}^2} \right) \left( 1 + \frac{U_{II}(z_1) - U_I(z_1)}{2\bar{k}^2} \right) \\ &\approx 1 \approx \hat{T}_0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Hiermit haben wir auch gezeigt, dass der Transmissionskoeffizient  $\hat{T}_0$  (der ja dem eben berechneten Ausdruck wegen  $|\hat{R}_0|^2 \approx 0$  entspricht) wie zu erwarten gleich Eins ist.

### 3.1.3 Superposition des Wellenpakets

Mit den Ergebnissen des letzten Abschnitt wollen wir nun das Wellenpaket als Superposition der ebenen Wellen berechnen. Neben den reellen Amplituden  $\hat{R}_0$  und  $\hat{S}_0$  müssen wir

aber noch die in  $R(k')$  und  $S(k')$  vorkommenden Phasenfaktoren berücksichtigen, die mit den Phasenfaktoren der ebenen Wellen zusammengefasst werden müssen.

Die zu superponierenden Wellen in den Bereichen  $I$  und  $II$  lauten

$$\begin{aligned}
 \psi_{k',I}(z,t) &\approx \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t - i \frac{k' \bar{k}}{m} t \right\} \left[ \exp \left\{ i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \hat{R}_0 \exp \left\{ 2i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} - i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right\} \right], \\
 \psi_{k',II}(z,t) &\approx \hat{S}_0 \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t - i \frac{k' \bar{k}}{m} t \right\} \\
 &\quad \times \exp \left\{ i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z_1) + 2\bar{k}k'} + i \int_{z_1}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z') + 2\bar{k}k'} \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Die weitere Rechnung verläuft analog wie in Abschnitt 2.3.1, Gl. (2.54 ff.), d.h. nach Entwicklung der Wurzeln wie in (2.58) ziehen wir die von  $k'$  unabhängigen Teile des Phasenfaktors vor das Fourier-Integral und erhalten nach einiger Rechnung schließlich im Bereich  $I$  das Ergebnis

$$\begin{aligned}
 \Psi_I(z,t) &= \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} \right\} \varphi(\zeta_I(z) - \tau(t)) \\
 &\quad + \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + 2i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} - i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} \right\} \\
 &\quad \times \varphi_{\text{ref}}(2\zeta_I(z_1) - \zeta_I(z) - \tau(t)).
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Hier ist  $\varphi(\zeta(z) - \tau(t))$  wieder definiert wie in (2.62) und  $\zeta_I(z)$  und  $\tau(t)$  wie in (2.45) (mit dem Potential  $V(z) = V_I(z) = U_I(z)/(2m)$ ). Die Einhüllende der reflektierten Welle  $\varphi_{\text{ref}}$  ist definiert durch

$$\varphi_{\text{ref}}(\zeta - \tau) := \hat{R}_0 \varphi(\zeta - \tau). \tag{3.27}$$

Wie am Argument von  $\varphi_{\text{ref}}$  in (3.26) zu erkennen ist, bewegt sich aufgrund des gleichen Vorzeichens bei  $\zeta_I(z)$  und  $\tau(t)$  der Schwerpunkt des reflektierten Wellenpakets genau in entgegengesetzte Richtung wie der Schwerpunkt des einlaufenden Pakets.

Im Bereich  $II$  ( $z_1 \leq z$ ) hat die Wellenfunktion folgende Gestalt:

$$\Psi_{II}(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} + i \int_{z_1}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z')} \right\} \quad (3.28)$$

$$\times \varphi_{\text{trans.}}(\zeta_I(z_1) + \zeta_{II}(z) - \tau(t))$$

mit

$$\zeta_{II}(z) := \int_{z_1}^z dz' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z')}} , \quad (3.29)$$

$$\varphi_{\text{trans.}}(\zeta - \tau) = \hat{S}_0(\zeta - \tau) . \quad (3.30)$$

Den Wellenfunktionen  $\Psi_{I,II}(z, t)$  sieht man sofort an, dass  $\Psi_I(z_1, t) = \Psi_{II}(z_1, t)$  erfüllt ist, da man dann die Gleichung (3.20) erhält.

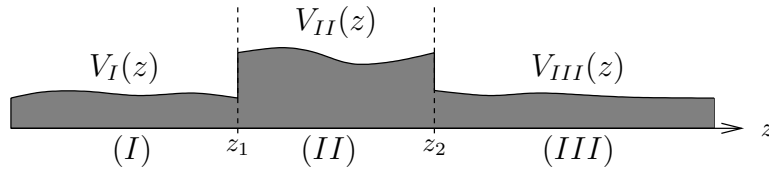
## 3.2 Streuung am Potentialwall

### 3.2.1 Rechnung für ebene WKB-Wellen

Wir gehen nun einen Schritt weiter und betrachten einen Potentialwall (siehe Abb. 3.2) der Form

$$V(z) = \begin{cases} V_I(z) & z < z_1 \\ V_{II}(z) & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_{III}(z) & z_2 < z \end{cases} \quad (3.31)$$

Die Näherungen (W1)-(W3) des letzten Abschnitts seien auch hier erfüllt.



**Abbildung 3.2:** Allgemeines Potential mit einem Wall zwischen  $z = z_1$  und  $z = z_2$ .

Wir werden die Rechnung, die vom Prinzip her völlig analog zur Rechnung an der Stufe ist, hier nicht in voller Länge aufschreiben und uns stattdessen auf die Angabe von Resultaten

beschränken. Um die Formeln möglichst übersichtlich zu gestalten, müssen wir erst einige Abkürzungen einführen. Es sei

$$\mathcal{W}_N(z) := \sqrt{(\bar{k} + k')^2 - U_N(z)} \quad (N = I, II, III) \quad (3.32)$$

$$\Upsilon_N(z_b, z_a) := \exp \left\{ i \int_{z_a}^{z_b} dz' \mathcal{W}_N(z') \right\} \quad (3.33)$$

Wie üblich wenden wir in den Wurzeln  $\mathcal{W}_N$  stets die Näherung (W2) an, d.h. wir vernachlässigen quadratische Beiträge in  $k'$ ,

$$\mathcal{W}_N(z) \approx \sqrt{\bar{k}^2 - U_N(z) + 2\bar{k}k'} . \quad (3.34)$$

Aus der Definition von  $\Upsilon_N(z_b, z_a)$  erhalten wir die folgenden Eigenschaften:

$$\Upsilon_N(z_b, z_a) = \Upsilon_N^{-1}(z_a, z_b) , \quad (3.35a)$$

$$\Upsilon_N(z, z) = 1 . \quad (3.35b)$$

Mit diesen Abkürzungen lauten die Wellenfunktionen in den einzelnen Bereichen analog zu (3.3):

$$\begin{aligned} \psi_{k',I}(z, t) &= e^{-i(\bar{k}^2 + 2\bar{k}k')t/(2m)} (\Upsilon_I(z, z_0) + R(k')\Upsilon_I(z_0, z)) , \\ \psi_{k',II}(z, t) &= e^{-i(\bar{k}^2 + 2\bar{k}k')t/(2m)} (A(k')\Upsilon_{II}(z, z_1) + B(k')\Upsilon_{II}(z_1, z)) , \\ \psi_{k',III}(z, t) &= e^{-i(\bar{k}^2 + 2\bar{k}k')t/(2m)} S(k')\Upsilon_{III}(z, z_2) . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Das zu lösende lineare Gleichungssystem, das aus der Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung an den Punkten  $z_{1,2}$  folgt, lautet mit diesen Bezeichnungen

$$\Upsilon_I(z_1, z_0) + R(k') \Upsilon_I(z_0, z_1) = A(k') + B(k') \quad (3.37a)$$

$$A(k') \Upsilon_{II}(z_2, z_1) + B(k') \Upsilon_{II}(z_1, z_2) = S(k') \quad (3.37b)$$

$$\Upsilon_I(z_1, z_0) - R(k') \Upsilon_I(z_0, z_1) = \frac{\mathcal{W}_{II}(z_1)}{\mathcal{W}_I(z_1)} (A(k') - B(k')) \quad (3.37c)$$

$$A(k') \Upsilon_{II}(z_2, z_1) - B(k') \Upsilon_{II}(z_1, z_2) = \frac{\mathcal{W}_{III}(z_2)}{\mathcal{W}_{II}(z_2)} S(k') \quad (3.37d)$$

Hierbei sind  $A(k')$  und  $B(k')$  die Koeffizienten für die in positive bzw. negative  $z$ -Richtung laufenden Anteile der Wellenfunktion im Bereich II. Das LGS (3.37) besteht aus vier Gleichungen für die vier unbekannten Koeffizienten  $A(k')$ ,  $B(k')$ ,  $R(k')$ ,  $S(k')$ . Arbeitet man sich durch die Rechnungen, so erhält man schließlich

$$R(k') = \Upsilon_I^2(z_1, z_0) \frac{\Upsilon_{II}(z_2, z_1)(\mathcal{W}_I + \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} - \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} + \Upsilon_{II}^{-1}(z_2, z_1)(\mathcal{W}_I - \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} + \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2}}{\Upsilon_{II}(z_2, z_1)(\mathcal{W}_I - \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} - \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} + \Upsilon_{II}^{-1}(z_2, z_1)(\mathcal{W}_I + \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} + \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2}} \quad (3.38)$$

$$S(k') = \frac{4\Upsilon_I(z_1, z_0)\mathcal{W}_I(z_1)\mathcal{W}_{II}(z_2)}{\Upsilon_{II}(z_2, z_1)(\mathcal{W}_I - \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} - \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} + \Upsilon_{II}^{-1}(z_2, z_1)(\mathcal{W}_I + \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} + \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2}} \quad (3.39)$$

Setzt man in diesen Ausdrücken  $U_I = U_{III} = 0$  und  $U_{II} = U = \text{const}$ , so erhält man schließlich die aus den Büchern über Quantenmechanik (z.B. [39], Bd.1, S. 93) bekannte Formel für den Transmissionskoeffizienten

$$T(k') = |S(k')|^2 = \frac{4\bar{k}^2(\bar{k}^2 - U)}{4\bar{k}^2(\bar{k}^2 - U) + \sin^2\left(\sqrt{\bar{k}^2 - U}(z_2 - z_1)\right)U^2} . \quad (3.40)$$

Somit haben wir die Richtigkeit der allgemeinen Formeln (3.38), (3.39) für die Koeffizienten  $R(k')$  und  $S(k')$  in diesem Fall überprüft.

### 3.2.2 Anwendungen der Näherung der WKB-Lösung

In den Ausdrücken für  $R(k')$  und  $S(k')$  betrachten wir nun wieder die gleichen Näherungen wie bei der Potentialstufe, d.h. wir verwenden Näherungen  $\hat{R}_0 = \hat{R}(k' = 0)$  und  $\hat{S}_0 = \hat{S}(k' = 0)$  für die Amplituden der Koeffizienten. In den Phasenfaktoren  $\Upsilon_N$  behalten wir analog zur Potentialstufe die  $2\bar{k}k'$ -Terme unter den Wurzeln  $\mathcal{W}_N$  bei.

Es gilt dann für im Rahmen der Näherungen (W2) und (W3) von Seite 20 für die Wurzel  $\mathcal{W}_N$ :

$$\mathcal{W}_N(z) \approx \sqrt{\bar{k}^2 - U_N(z)} \approx \bar{k} \left(1 - \frac{U_N(z)}{2\bar{k}^2}\right) . \quad (3.41)$$

Betrachten wir zunächst den Zähler von  $S(k')$  aus (3.39), so ist

$$4\Upsilon_I(z_1, z_0)\mathcal{W}_I(z_1)\mathcal{W}_{II}(z_2) \approx 4\Upsilon_I(z_1, z_0) (\bar{k}^2 - U_I(z_1) - U_{II}(z_2)) . \quad (3.42)$$

Für die Produkte der Wurzeln  $\mathcal{W}_N$  gilt weiter

$$\begin{aligned} (\mathcal{W}_I - \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} - \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} &= \mathcal{W}_I(z_1)\mathcal{W}_{II}(z_2) + \mathcal{W}_{II}(z_1)\mathcal{W}_{III}(z_2) \\ &\quad - \mathcal{W}_I(z_1)\mathcal{W}_{III}(z_2) - \mathcal{W}_{II}(z_1)\mathcal{W}_{II}(z_2) \\ &\approx -U_I(z_1) - U_{II}(z_2) - U_{II}(z_1) - U_{III}(z_2) \\ &\quad + U_I(z_1) + U_{III}(z_2) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$



$$\begin{aligned}
(\mathcal{W}_I + \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} + \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} &= \mathcal{W}_I(z_1) \mathcal{W}_{II}(z_2) + \mathcal{W}_{II}(z_1) \mathcal{W}_{III}(z_2) \\
&\quad + \mathcal{W}_I(z_1) \mathcal{W}_{III}(z_2) + \mathcal{W}_{II}(z_1) \mathcal{W}_{II}(z_2) \\
&\approx -U_I(z_1) - U_{II}(z_2) - U_{II}(z_1) - U_{III}(z_2) \\
&\quad - U_I(z_1) - U_{III}(z_2) - U_{II}(z_1) - U_{II}(z_2) \\
&= 4\bar{k}^2 - 2[U_I(z_1) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) + U_{III}(z_2)]
\end{aligned} \tag{3.44}$$

$$\begin{aligned}
(\mathcal{W}_I + \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} - \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} &= \mathcal{W}_I(z_1) \mathcal{W}_{II}(z_2) - \mathcal{W}_{II}(z_1) \mathcal{W}_{III}(z_2) \\
&\quad - \mathcal{W}_I(z_1) \mathcal{W}_{III}(z_2) + \mathcal{W}_{II}(z_1) \mathcal{W}_{II}(z_2) \\
&\approx 4\bar{k}^2 - U_I(z_1) - U_{II}(z_2) + U_{II}(z_1) + U_{III}(z_2) \\
&\quad + U_I(z_1) + U_{III}(z_2) - U_{II}(z_1) - U_{II}(z_2) \\
&= -2[U_{II}(z_2) - U_{III}(z_2)]
\end{aligned} \tag{3.45}$$

$$\begin{aligned}
(\mathcal{W}_I - \mathcal{W}_{II}) \Big|_{z_1} (\mathcal{W}_{II} + \mathcal{W}_{III}) \Big|_{z_2} &= \mathcal{W}_I(z_1) \mathcal{W}_{II}(z_2) - \mathcal{W}_{II}(z_1) \mathcal{W}_{III}(z_2) \\
&\quad + \mathcal{W}_I(z_1) \mathcal{W}_{III}(z_2) - \mathcal{W}_{II}(z_1) \mathcal{W}_{II}(z_2) \\
&\approx -U_I(z_1) - U_{II}(z_2) + U_{II}(z_1) + U_{III}(z_2) \\
&\quad - U_I(z_1) - U_{III}(z_2) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) \\
&= -2[U_I(z_1) - U_{II}(z_1)]
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Somit wird  $S(k')$  zu

$$\begin{aligned}
S(k') &\approx \frac{\Upsilon_{II}(z_2, z_1) \Upsilon_I(z_1, z_0) [\bar{k}^2 - U_I(z_1) - U_{II}(z_2)]}{\bar{k}^2 - \frac{1}{2}[U_I(z_1) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) + U_{III}(z_2)]} \\
&=: \Upsilon_{II}(z_2, z_1) \Upsilon_I(z_1, z_0) \hat{S}_0,
\end{aligned} \tag{3.47}$$

und setzt sich somit (im Falle von reellen Potentialen) wieder aus einem Phasenfaktor

$$\begin{aligned}
\Upsilon_{II}(z_2, z_1) \Upsilon_I(z_1, z_0) &\approx \exp \left\{ i \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} \right. \\
&\quad \left. + i \int_{z_1}^{z_2} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z') + 2\bar{k}k'} \right\}
\end{aligned} \tag{3.48}$$

und einer reellen, von  $k'$  unabhängigen Amplitude  $\hat{S}_0$  zusammen. Der Reflexionskoeffizient  $R(k')$  wird zu

$$\begin{aligned}
R(k') &\approx -\Upsilon_{II}(z_2, z_1) \Upsilon_I^2(z_1, z_0) \\
&\quad \times \frac{\Upsilon_{II}(z_2, z_1) [U_{II}(z_2) - U_{III}(z_2)] + \Upsilon_{II}^{-1}(z_2, z_1) [U_I(z_1) - U_{II}(z_1)]}{2\bar{k}^2 - [U_I(z_1) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) + U_{III}(z_2)]}.
\end{aligned} \tag{3.49}$$


---

Bei reellen Potentialen setzt sich der Reflexionskoeffizient für den Potentialwall also aus der Summe zweier Ausdrücke zusammen, die jeweils die Gestalt eines Phasenfaktors multipliziert mit einer Amplitude haben. Des Weiteren sind die Größenverhältnisse von  $R(k')$  und  $S(k')$  wie bei der Potentialstufe.

Die Berechnung der Wellenpakete gestaltet sich nun analog wie bei der Potentialstufe, d.h. wir spalten die Koeffizienten  $R(k')$  und  $S(k')$  jeweils auf in Amplitude und Phasenfaktor. Die Phasenfaktoren ändern dann die Argumente der reflektierten bzw. transmittierten Einhüllenden  $\varphi_{\text{ref/trans.}}$  ab und liefern außerdem zusätzliche, konstante Phasenfaktoren.

Es ergibt sich

$$R(k') \approx \exp \{2i\phi_I(k') + 2i\phi_{II}(k')\} \hat{R}_0^{(I)} + \exp \{2i\phi_I(k')\} \hat{R}_0^{(I)} \quad (3.50)$$

$$S(k') \approx \exp \{i\phi_I(k') + i\phi_{II}(k')\} \hat{S}_0 \quad (3.51)$$

mit

$$\phi_I(k') := \int_{z_0}^{z_1} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z') + 2\bar{k}k'} , \quad (3.52a)$$

$$\phi_{II}(k') := \int_{z_1}^{z_2} dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_{II}(z') + 2\bar{k}k'} , \quad (3.52b)$$

$$\hat{R}_0^{(I)} := \frac{U_{II}(z_1) - U_I(z_1)}{2\bar{k}^2 - (U_I(z_1) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) + U_{III}(z_2))} , \quad (3.52c)$$

$$\hat{R}_0^{(II)} := \frac{U_{III}(z_2) - U_{II}(z_2)}{2\bar{k}^2 - (U_I(z_1) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) + U_{III}(z_2))} , \quad (3.52d)$$

$$\hat{S}_0 := \frac{2(\bar{k}^2 - U_I(z_1) - U_{II}(z_2))}{2\bar{k}^2 - (U_I(z_1) + U_{II}(z_1) + U_{II}(z_2) + U_{III}(z_2))} . \quad (3.52e)$$

Für die Wellenpakete in den Bereichen  $I$  und  $III$  folgt dann nach einiger Rechnung

$$\begin{aligned} \Psi_I(z, t) = & \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} \right\} \varphi(\zeta_I(z) - \tau(t)) \\ & + \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + 2i\phi_I(0) - i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} \right\} \varphi_{\text{ref}}^{(I)}(z, t) \end{aligned} \quad (3.53a)$$

$$+ \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + 2i[\phi_I(0) + \phi_{II}(0)] - i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_I(z')} \right\} \varphi_{\text{ref}}^{(II)}(z, t) ,$$

$$\varphi_{\text{ref}}^{(I)}(z, t) := \hat{R}_0^{(I)} \varphi(2\zeta_I(z_1) - \zeta_I(z) - \tau(t)) , \quad (3.53b)$$

$$\varphi_{\text{ref}}^{(II)}(z, t) := \hat{R}_0^{(II)} \varphi(2\zeta_I(z_1) + 2\zeta_{II}(z_2) - \zeta_I(z) - \tau(t)) \quad (3.53c)$$

und

$$\Psi_{III}(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \phi_I(0) + i \phi_{II}(0) + i \int_{z_2}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - U_{III}(z')} \right\} \quad (3.54a)$$

$$\times \varphi_{\text{trans.}}(z, t) ,$$

$$\varphi_{\text{trans.}}(z, t) := \hat{S}_0 \varphi(\zeta_I(z_1) + \zeta_{II}(z_2) + \zeta_{III}(z) - \tau(t)) . \quad (3.54b)$$

Die Definitionen von  $\zeta_{II,III}(z)$  sind analog wie in (3.29), mit dem Ort des jeweils vorangegangenen Potentialsprungs als Untergrenze der Integration. Eine Verallgemeinerung der Formeln auf beliebig viele Potentialsprünge ist mit den hier dargestellten Ergebnissen auf einfache Weise möglich, sofern man sich nur für das einlaufende (und insgesamt reflektierte) und das auslaufende Wellenpaket interessiert.

### 3.3 Anwendung auf ein einfaches, longitudinales Atomstrahl-Spinecho-Experiment

Wir wollen nun an einem sehr einfachen Beispiel demonstrieren, dass wir im Prinzip bereits jetzt in der Lage sind, das Fahrplanmodell so, wie es in [13], Abschnitt 3.3.3, S. 55ff. dargestellt ist, zu reproduzieren. Dazu ist es allerdings nötig, bereits die inneren atomaren Zustände zu berücksichtigen, die wir bisher aber noch nicht eingeführt haben. Wir wollen deshalb im nächsten Abschnitt 3.3.1 einige Grundlagen zur Beschreibung eines Atoms mit mehreren inneren Zuständen angeben, ohne jedoch zu sehr ins Detail zu gehen. In Kap. 6 greifen wir dieses Thema erneut auf und werden dann auch die theoretischen Hintergründe genauer erarbeiten. Um mit der Notation in Kap. 6 übereinzustimmen, werden wir bei allen Formeln, die im Zusammenhang mit der Betrachtung eines Atoms stehen, wieder Großbuchstaben für die Ortskoordinate  $Z$  (Schwerpunktskoordinate des Atoms) und die Masse  $M$  (Gesamtmasse des Atoms) verwenden.

In Abschnitt 3.3.2 wollen wir einen kurzen Rückblick auf frühere Arbeiten wagen, die sich mit Atomen in elektrischen Feldern im Zusammenhang mit der Paritätsverletzung beschäftigt haben (siehe z.B. [31]). Das Thema der Paritätsverletzung in Atomen, für die wir ja die Theorie des longitudinalen Atomstrahl-Spinechos eigentlich entwickeln, greifen wir in der vorliegenden Arbeit aber erst in Kap. 7 wieder auf, wo wir P-verletzende geometrische Phasen studieren werden.

In Abschnitt 3.3.3 kommen wir endlich zur Einführung des Fahrplanmodells und der Beschreibung des LABSE-Beispiel-experiments.

### 3.3.1 Grundlagen zur Beschreibung eines Atoms mit mehreren inneren Zuständen

Der atomare Gesamtzustand  $|\Psi(z, t)\rangle$  ist im Allgemeinen eine Superposition mehrerer, innerer atomarer Eigenzustände, die sich durch gewissen Quantenzahlen (z.B. Hauptquantenzahl, Gesamtdrehimpuls usw.) unterscheiden. Für die in diesem Abschnitt angestrebte Beschreibung des Fahrplanmodells genügt eine oberflächliche Betrachtung des Atoms. Wir wollen daher einfach die inneren atomaren Zustände kennzeichnen durch

$$|\alpha\rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (3.55)$$

Der Index  $\alpha$  nummeriert die insgesamt  $N$  atomaren Zustände in geeigneter Weise durch. Die Diracsche Schreibweise mit runden Klammern verwenden wir generell zur Kennzeichnung eines inneren atomaren Zustands.

Zur Zeit  $t = 0$  befinde sich das Atom am Ort  $Z_0$  (im feldfreien Raum) in einem inneren Gesamtzustand

$$|\chi\rangle = \sum_{\alpha=1}^N \hat{\chi}_{\alpha} |\alpha(Z_0)\rangle, \quad \sum_{\alpha=1}^N |\hat{\chi}_{\alpha}|^2 = 1, \quad (3.56)$$

was z.B. eine vorgegebene Polarisierung sein könnte. Es liegt nun nahe, den gesamten atomaren Anfangszustand als ein Produkt von Wellenfunktion und innerem Gesamtzustand zu schreiben, d.h.

$$|\Psi(Z, t=0)\rangle = \Psi(Z, t=0) |\chi\rangle. \quad (3.57)$$

So bekommt schließlich jeder einzelne, innere atomare Zustand  $|\alpha(Z_0)\rangle$  ein eigenes Wellenpaket mit einer durch die Schrödinger-Gleichung bestimmten Zeitentwicklung, die im Allgemeinen für jedes Wellenpaket unterschiedlich ist. Die atomaren Eigenzustände  $|\alpha(Z)\rangle$  an einem Ort  $Z \neq Z_0$  sind bei angelegten äußeren Feldern Superpositionen der freien Zustände  $|\alpha(Z_0)\rangle$ , den atomaren Gesamtzustand am Ort  $Z$  kann man aber dennoch zu jeder Zeit  $t$  als Superposition der lokalen atomaren Eigenzustände schreiben, d.h.

$$|\Psi(Z, t)\rangle = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(Z, t) |\alpha(Z)\rangle. \quad (3.58)$$

In diesem Abschnitt wollen wir nur den adiabatischen Grenzfall betrachten, in dem sich die Zusammensetzung der inneren atomaren Zustände in den Potentialen so langsam ändert, dass die Amplituden  $\Psi_{\alpha}(Z, t)$  nicht miteinander mischen und somit unabhängig voneinander sind. Bei vorausgesetzter Gültigkeit der Näherungen (W1)-(W3) können wir dann z.B. die WKB-Wellenpakete als Grundlage für die  $\Psi_{\alpha}(Z, t)$  wählen, d.h.

$$\Psi_{\alpha}(Z, t) = \hat{\chi}_{\alpha} e^{i\phi_{\alpha}(Z, t)} \varphi(\zeta_{\alpha}(Z) - \tau(t)) \quad (3.59)$$

mit

$$\phi_\alpha(Z, t) := -\frac{\bar{k}^2}{2M}t + \int_{Z_0}^Z dZ' \sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z')} , \quad (3.60)$$

und

$$\zeta_\alpha(Z) = \int_{Z_0}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z')}} , \quad (3.61)$$

denn die lokalen Zustände  $|\alpha(Z)\rangle$  werden im Allgemeinen unterschiedlichen Potentialen  $V_\alpha(Z)$  unterliegen. In Kap. 6 werden wir die Definition von  $\zeta_\alpha(Z)$  noch etwas genauer untersuchen und besser motivieren. Für den Augenblick soll uns die Tatsache ausreichen, dass durch die Definition (3.61) jedes WKB-Wellenpaket eine individuelle Schwerpunktsbewegung erfährt, abhängig vom jeweiligen Zustands-Potential  $V_\alpha(Z)$ . Sind die Potentiale Null<sup>1</sup>, so haben alle Wellenpakete die gleiche, mittlere Geschwindigkeit  $\bar{k}/m$ .

### 3.3.2 Zusammenhang mit früheren Arbeiten

In bisherigen Arbeiten zum Thema Paritätsverletzung in leichten Atomen (siehe z.B. [32, 31, 33, 34, 36]) wurden nur Atome in Ruhe betrachtet, die sich in einem zeitabhängigen Potential befinden. Auf diese Weise spart man sich die Beschreibung des Atoms als Wellenfunktion. Um zu verstehen, wie man prinzipiell P-Verletzung mit einem IABSE-Experiment nachweisen könnte, kommt man aber nicht um die Beschreibung der Atome im Ortsraum als Wellenfunktion herum.

Im Ruhesystem des Atoms sollte unsere Beschreibung aber äquivalent zur früheren Betrachtungsweise sein und zu den gleichen Resultaten führen. Wir wollen uns in diesem Abschnitt ansatzweise von der Richtigkeit dieser Behauptung überzeugen.

In früheren Arbeiten wurde das Atom durch den rein zeitabhängigen Zustandsvektor  $|t\rangle$  (hier schreiben wir  $|\Psi(t)\rangle$ ) repräsentiert, der sich gemäß der SG (s. [31], Gl. (3.9))

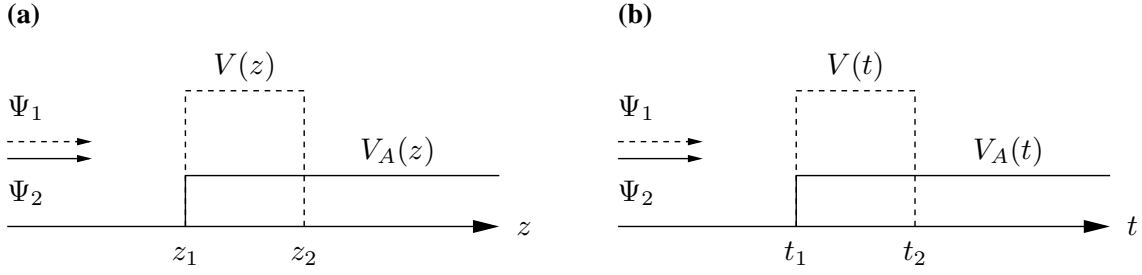
$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \quad (3.62)$$

zeitlich entwickelte. Der Hamilton-Operator  $H$  des Atoms (inkl. P-Verletzung und Zerfall aus angeregten Niveaus) wurde in einem Unterraum zu fester Hauptquantenzahl  $n$  als

---

<sup>1</sup> In Kapitel 6 werden wir sehen, dass anstelle der Potentiale  $V_\alpha(Z)$  eigentlich die Potentialdifferenz  $\Delta V_\alpha(Z) = V_\alpha(Z) - V_\alpha(Z_0)$  zu verwenden ist, wenn man von gewissen Voraussetzungen ausgeht. Wir wollen in diesem Kapitel nicht weiter auf diese subtilen Feinheiten der Theorie eingehen.

---



**Abbildung 3.3:** Ein Beispiel zur Verdeutlichung der Äquivalenz der Beschreibungen aus früheren Arbeiten (b) und aus dieser Arbeit (a).

Matrix  $\mathcal{M}$  repräsentiert und die Zeitentwicklung von  $|\Psi(t)\rangle$  konnte geschrieben werden als (s. [31], Gl. (3.11))

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{M}t}|\Psi(0)\rangle, \quad (3.63)$$

Im Bereich eines konstanten Potentials zwischen zwei Zeiten  $t_1 < t_2$  kann das Eigenwertproblem für  $\mathcal{M}$  gelöst werden und man erhält dann die Zeitentwicklung

$$|\Psi_E(t_2)\rangle = e^{-iE(t_2-t_1)}|\Psi_E(t_1)\rangle = e^{-iE\Delta t}|\Psi_E(t_1)\rangle, \quad (3.64)$$

für einen Eigenzustand von  $\mathcal{M}$  zur Energie  $E$ .

Ein einfaches Beispiel soll den Zusammenhang der Rechnungen in dieser Arbeit und den Rechnungen vorhergehender Arbeiten demonstrieren. Wir betrachten einfach eine kohärente Superposition zweier Zustände, die wir mit  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  bezeichnen wollen. Der Zustand  $\Psi_1$  durchquert einen Potentialwall der Höhe  $V$ , der Zustand  $\Psi_2$ , den wir als Analysatorzustand verwenden wollen, passiere eine Potentialstufe der Höhe  $V_A$ . In Abb. 3.3a ist die Situation dargestellt, die wir in der vorliegenden Arbeit betrachten: Die Zustände sind mit Wellenpaketen verknüpft, die die stationären, ortsabhängigen Potentiale durchlaufen. In Abb. 3.3b ist die Situation aus früheren Arbeiten gezeigt, wo das betrachtete Atom in Ruhe ist und die Potentiale zeitabhängig sind.

Wir beginnen bei der Situation aus Abb. 3.3b, d.h. wir gehen von einem Anfangszustand<sup>2</sup> zur Zeit  $t = 0$  aus,

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle). \quad (3.65)$$

Wir entwickeln diesen Zustand nun nach der Zeit, wobei wir, wie in Abb. 3.3b dargestellt, der Einfachheit halber von einem verschwindenden Potential vor der Zeit  $t_1$  für beide Zustände ausgehen. Nach (3.64) lautet der Zustand zu einer Zeit  $t \geq t_2$  dann

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iV(t_2-t_1)}|\Psi_1\rangle + e^{-iV_A(t-t_1)}|\Psi_2\rangle). \quad (3.66)$$

---

<sup>2</sup>Die in diesem Abschnitt betrachteten Zustände sind lediglich Beispiele ohne wirkliche physikalische Bedeutung.

Wir können zu dieser Zeit z.B. eine Messung des Anteils des Anfangszustands im Endzustand durchführen, d.h. wir betrachten die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}\rho(t) &= |\langle \Psi(t=0) | \Psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left| e^{-iV(t_2-t_1)} + e^{-iV_A(t-t_1)} \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left| 1 + e^{-i(V_A-V)(t_2-t_1)-iV_A(t-t_2)} \right|^2.\end{aligned}\quad (3.67)$$

Wie man sieht, wird die Wahrscheinlichkeitsdichte mit der Zeit oszillieren. Die unterschiedlichen Potentiale der beiden Zustände sorgen für einen zusätzlichen Phasenschub. Wären beide Potentiale identisch gewesen, würde die Wahrscheinlichkeitsdichte einfach den Wert Eins annehmen.

Nun betrachten wir die in dieser Arbeit vorliegende Situation, wobei wir für den Moment nur die relative Phase berücksichtigen wollen, die Schwerpunktsbewegung wird im nächsten Abschnitt ausführlich betrachtet. Wir setzen daher in den Formeln für das WKB-Wellenpaket stets die Einhüllende zu  $\varphi(\zeta) \equiv 1$ . Nach den Formeln für die transmittierten Anteile der Wellenfunktionen bei der Potentialstufe (3.28) und beim Potentialwall (3.54) haben die Phasenfaktoren der beteiligten Zustände an einem Ort  $z \geq z_2$  die Gestalt

$$\begin{aligned}|\Psi(z, t)\rangle &\sim \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t \right\} \\ &\times \left( \exp \left\{ i\bar{k}(z_1 - z_0) + i\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV}(z_2 - z_1) + i\bar{k}(z - z_2) \right\} |\Psi_1\rangle \right. \\ &\quad \left. \exp \left\{ i\bar{k}(z_1 - z_0) + i\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV_A}(z - z_1) \right\} |\Psi_2\rangle \right)\end{aligned}\quad (3.68)$$

Wir haben die Einhüllende  $\varphi(\zeta)$  hier einfach vernachlässigt bzw. gleich Eins gesetzt. Nun projizieren wir wieder auf den Anfangszustand, der an einem Anfangsort  $z_0$  die Form

$$|\Psi(z_0, t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle) \quad (3.69)$$

haben soll. Wir erhalten dann (unter der Annahme, dass die  $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$  orthonormal zueinander sind) analog wie oben die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}\rho(z) &= |\langle \Psi(t=0) | \Psi(t) \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left| 1 + e^{-i(\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV} - \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV_A})(z_2 - z_1) - i(\bar{k} - \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV_A})(z - z_2)} \right|^2.\end{aligned}\quad (3.70)$$

Wie man sieht, ist in diesem speziellen, einfachen Fall keine Zeitabhängigkeit mehr in der Wahrscheinlichkeitsdichte vorhanden. Der relative Phasenwinkel kann für sehr kleine Potentiale entwickelt werden und lautet dann

$$\begin{aligned}&(\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV} - \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV_A})(z_2 - z_1) + (\bar{k} - \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV_A})(z - z_2) \\ &\approx (V_A - V) \frac{\bar{k}}{m} (z_2 - z_1) + V_A \frac{\bar{k}}{m} (z - z_2)\end{aligned}\quad (3.71)$$


---

Dies kann direkt mit dem relativen Phasenwinkel aus (3.67) verglichen werden, d.h. mit

$$(V_A - V)(t_2 - t_1) + V_A(t - t_2) . \quad (3.72)$$

Im ortsabhängigen Fall wird also lediglich die Zeitdifferenz  $t_2 - t_1$  durch die mittlere Geschwindigkeit  $\bar{k}/m$  multipliziert mit der Breite des Potentialwalls ersetzt, d.h. durch die (mittlere) Durchflugszeit.

Dieses einfache Beispiel zeigt also, das die bisher aufgestellte Theorie bereits in der Lage ist, die Ergebnisse der früheren Arbeiten zu reproduzieren und in dem hier betrachteten Spezialfall auch äquivalent zur damaligen Beschreibung ist. Durch die Berücksichtigung von orts- und zeitabhängigen Wellenfunktionen in Verbindung mit den inneren atomaren Zuständen werden wir aber am Ende von Kapitel 6 in der Lage sein, wesentlich komplexere, physikalische Vorgänge als in früheren Arbeiten theoretisch zu beschreiben. Diese Komplexität hat natürlich ihren Preis und wird sich, wie wir später noch sehen werden, auch in den Formeln niederschlagen.

### 3.3.3 Das Fahrplanmodell

Das Fahrplanmodell (siehe [13], Kap. 3.3.3)<sup>3</sup> liefert eine anschauliche, grafische Darstellung der Schwerpunktsbewegung der Wellenpakete, die zu verschiedenen atomaren Eigenzuständen gehören und gibt einen einfachen Überblick über die Lage der Interferenzpunkte und über die beteiligten Zustände.

Eine saubere theoretische Beschreibung des Fahrplanmodell gab es bisher nicht. In diesem Abschnitt wollen wir demonstrieren dass wir bereits jetzt, mit den bisher aufgestellten Formeln, in der Lage sind, das Fahrplanmodell theoretisch zu beschreiben. Wir sind darüberhinaus in der Lage, die zugrundeliegenden physikalischen Vorgänge zu verstehen und Grenzen des Fahrplanmodells aufzuzeigen.

Wir wollen uns in diesem Abschnitt eng an das Beispiel des Wasserstoffspinechos halten, das auch ausführlich in [13], Kap. 3, diskutiert ist. Auf diese Weise können wir unsere Resultate stets direkt mit den Ergebnissen aus [13] vergleichen.

Wir betrachten der Einfachheit halber ein Gaußsches Wellenpaket, dessen Einhüllende  $\varphi(\zeta)$  um den Punkt  $\hat{\zeta} = 0$  zentriert sei, siehe Abb. 3.4. Die Schwerpunktsbewegung des zu einem bestimmten, atomaren Zustand  $|\alpha(Z)\rangle$  gehörenden WKB-Wellenpakets (3.59) ergibt sich, wie bei der Diskussion am Ende von Abschnitt 2.3.2, aus der Kombination der Funktionen  $\zeta_\alpha(Z)$  aus (3.61) und  $\tau(t)$  aus (2.45) im Argument der Einhüllenden und der Forderung

---

<sup>3</sup> Dem aufmerksamen Leser mag aufgefallen sein, dass die Nummer des Kapitels „Fahrplanmodell“ der zitierten, experimentellen Dissertation [13] exakt mit der Nummer dieses Abschnitts übereinstimmt, der ebenfalls das Fahrplanmodell behandelt. Ich versichere, dass dies reiner Zufall ist und nicht beabsichtigt war, lade den Leser aber herzlich zum Nachdenken über die mystische Bedeutung dieses Zufalls ein.

---



$$\zeta_\alpha(\hat{Z}_\alpha(t)) - \tau(t) = \int_{Z_0}^{\hat{Z}_\alpha(t)} dZ' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z')}} - \tau(t) \stackrel{!}{=} \hat{\zeta} = 0. \quad (3.73)$$

Die zeitabhängige Bewegung der Schwerpunktskoordinate  $\hat{Z}_\alpha(t)$  ist durch diese Gleichung implizit festgelegt und entspricht der Bewegung eines klassischen Teilchens durch das Potential  $V_\alpha(Z)$ .

In dem in [13] definierten Fahrplanmodell wird nun nach der Position des Schwerpunkts (hier gleich dem Maximum) des  $\alpha$ -ten Wellenpakets zu einer Zeit  $t$  gefragt, bei der der Schwerpunkt eines freien Wellenpakets am Ort  $Z$  liegt. Für ein freies Wellenpaket gilt nach Voraussetzung  $V(Z) \equiv 0$ , also ist die freie Schwerpunktsbewegung nach (3.73) einfach durch

$$\hat{Z}_{\text{frei}}(t) = Z_0 + \tau(t) \quad (3.74)$$

gegeben. Befindet sich das freie Wellenpaket am Ort  $\hat{Z}_{\text{frei}}(t) = Z_0 + \tau(t)$ , so ist die Koordinate  $\zeta_\alpha(\hat{Z}_\alpha(t))$  des Wellenpakets mit Index  $\alpha$  zur gleichen Zeit  $t$  gegeben durch

$$0 = \zeta_\alpha(\hat{Z}_\alpha(t)) - \tau(t) = \zeta_\alpha(\hat{Z}_\alpha(t)) - (\hat{Z}_{\text{frei}}(t) - Z_0). \quad (3.75)$$

Wir können die Zeitabhängigkeit eliminieren, indem wir  $Z = \hat{Z}_{\text{frei}}(t)$  und somit nach Gl. (3.74)  $t = M(Z - Z_0)/\bar{k}$  setzen und

$$\zeta_\alpha(\hat{Z}_\alpha(t))|_{t=M(Z-Z_0)/\bar{k}} = Z - Z_0 \quad (3.76)$$

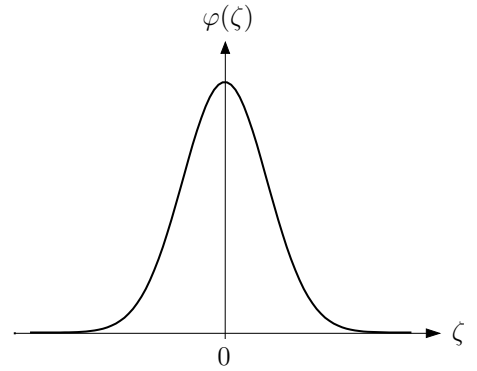
erhalten. Durch diese Gleichung ist implizit die Abhängigkeit des Schwerpunkts  $\hat{Z}_\alpha$  des Wellenpakets mit Index  $\alpha$  vom Ort  $Z$  auf der Strahlachse definiert, der laut Rechnung dem Ort des Schwerpunkts eines freien Wellenpakets entspricht.

Die Berechnung von  $\hat{Z}_\alpha$  als Funktion von  $Z$  durch Lösen der Gleichung (3.76) ist sehr umständlich. Einfacher ist die direkte Betrachtung der Koordinatenfunktion  $\zeta_\alpha(Z)$  am Ort  $Z$ . Für das freie Wellenpaket gilt

$$\zeta_{\text{frei}}(Z) = Z - Z_0 \quad (3.77)$$

und wir können z.B. nach dem Wert der Funktionen

$$\Delta\zeta_\alpha(Z) := \zeta_\alpha(Z) - \zeta_{\text{frei}}(Z) = \zeta_\alpha(Z) - (Z - Z_0) \quad (3.78)$$



**Abbildung 3.4:** Ein um  $\hat{\zeta} = 0$  zentriertes Gauß-Paket.

fragen. Die physikalische Bedeutung dieser Größe sieht man nach Multiplikation mit der inversen, mittleren Geschwindigkeit  $\bar{v}^{-1} = M/\bar{k}$ . Dann folgt nämlich nach Einsetzen der Definition (3.61) von  $\zeta_\alpha(Z)$

$$\frac{M}{\bar{k}} \Delta \zeta_\alpha(Z) = \int_{Z_0}^Z dZ' \frac{M}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z')}} - T_{\text{frei}}(Z) , \quad (3.79)$$

wobei  $T_{\text{frei}}(Z)$  die Zeit ist, die ein freies Wellenpaket mit der Geschwindigkeit  $\bar{v}$  braucht, um von  $Z_0$  nach  $Z$  zu gelangen. Im gleichen Sinne kann das in (3.79) auftretende Integral interpretiert werden. Der Integrand ist das Inverse der lokalen Geschwindigkeit

$$v_\alpha(Z) := \frac{\sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z)}}{M} \quad (3.80)$$

und demzufolge ist das Ortsintegral einfach die Gesamtzeit  $T_\alpha(Z)$ , die der Schwerpunkt des  $\alpha$ -ten Wellenpakets braucht, um durch das Potential  $V_\alpha(Z')$  von  $Z_0$  nach  $Z$  zu gelangen. Der gesamte Ausdruck (3.79) ist also nichts weiter als die Zeitdifferenz  $\Delta T_\alpha(Z)$  zwischen dem Eintreffen der Schwerpunkte des  $\alpha$ -ten und des freien Wellenpakets am Ort  $Z$ , wenn beide gleichzeitig bei  $Z_0$  gestartet sind. Wir definieren also

$$\begin{aligned} \Delta T_\alpha(Z) &= \frac{M}{\bar{k}} \Delta \zeta_\alpha(Z) \\ &:= T_\alpha(Z) - T_{\text{frei}}(Z) = \int_{Z_0}^Z dZ' \frac{M}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z')}} - \frac{M}{\bar{k}}(Z - Z_0) . \end{aligned} \quad (3.81)$$

Die Größe  $\Delta T_\alpha(Z)$  ist viel leichter zugänglich als der tatsächliche Ort  $\hat{Z}_\alpha(Z)$  des Schwerpunkts, für den man die Koordinate  $\zeta_\alpha(Z)$  erst invertieren müsste. Ein viel klareres und auch einfacher zu berechnendes Bild der Schwerpunktsbewegung bekommt man tatsächlich durch die Verwendung von  $\Delta T_\alpha(Z)$ . Hierfür muss man nur die Koordinatenfunktionen  $\zeta_\alpha(Z)$  kennen und numerisch berechnen, was man aber für die Berechnung der Wellenfunktion ohnehin hätte tun müssen. Wir bekommen bei der Beschreibung eines LABSE-Experiments den Fahrplan also sozusagen geschenkt. Auf der anderen Seite kann man den Fahrplan leicht berechnen, ohne die Wellenfunktionen zu kennen, d.h. man kann auf einfache Weise Fahrpläne für verschiedene Feldkonfigurationen erstellen und erst dann entscheiden, für welche Konfiguration man eine komplette theoretische Beschreibung des atomaren Zustands und schließlich des LABSE-Experiments liefert.

Nun wollen wir zum Wasserstoffspinecho zurück kommen. Im Grundzustand gibt es vier atomare Eigenzustände: drei mit Gesamtdrehimpuls  $F = 1$  ( $F_3 = \pm 1, 0$ ) und einen mit  $F = F_3 = 0$ . Diese koppeln in einem Magnetfeld zu Energieeigenzuständen, die wir wie-

der mit  $|\alpha\rangle$  ( $\alpha = 1, 2, 3, 4$ ) bezeichnen wollen<sup>4</sup>. Das Eigenwertproblem für Wasserstoff im Grundzustand in einem magnetischen Feld wurde gelöst und ist im Anhang B.2.1 dargestellt. In Tabelle B.3 kann man die eben angesprochenen Eigenzustände im Magnetfeld ablesen, ebenso wie die jeweiligen Eigenenergien.

Die grafische Darstellung der Eigenenergien in Abhängigkeit des angelegten magnetischen Felds  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_3$  in  $Z$ -Richtung kann man im Breit-Rabi-Diagramm, Abb. 3.5, ablesen. Wie man sieht, haben die Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  eine lineare Energieabhängigkeit vom Magnetfeld, der Zustand  $|2\rangle$  (und auch  $|4\rangle$ ) besitzt dagegen eine quadratische Energieabhängigkeit.

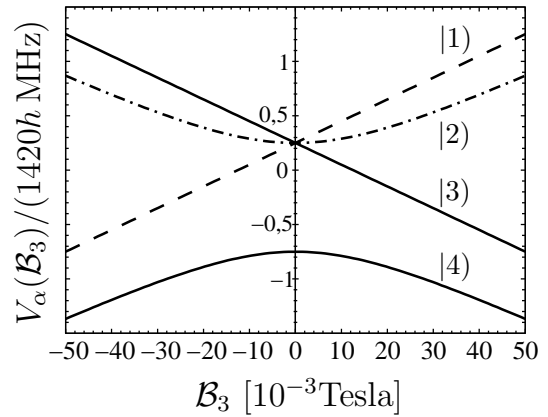
Wir betrachten nun einen Zustand im Magnetfeld mit Gesamtdrehimpuls Eins in  $x$ -Richtung, d.h. einen Eigenzustand zum Operator  $F_x$  mit Eigenwert  $F_x = 1$ , sowie zum Operator  $F^2$  mit Eigenwert  $F(F+1) = 2$ :

$$|1_x\rangle := \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle. \quad (3.82)$$

In diesem Fall ist es günstig, die Energien der Zustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  im Limes  $\mathcal{B} \rightarrow 0$  als Nullpunkt zu wählen. Weiterhin betrachten wir nur sehr geringe Magnetfelder<sup>5</sup>, die etwa bei 1-4% des kritischen Magnetfelds<sup>6</sup> von  $\mathcal{B}_{\text{kr}} = 50 \text{ mT}$  liegen. In diesem Bereich gilt näherungsweise (siehe Tab. B.3)

$$E_{1,3}(\mathcal{B}) = \pm \frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B}, \quad E_2(\mathcal{B}) \approx \frac{(\frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B})^2}{2A}, \quad (3.83)$$

wobei  $g \approx 2$  der Landé-Faktor des Elektrons,  $\mu_B$  das Bohrsche Magneton und  $A = 1420h \text{ MHz} \approx 6 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$  die Hyperfeinaufspaltung des Wasserstoffs ist.



**Abbildung 3.5:** Breit-Rabi-Diagramm für Wasserstoff im  $(n=1)$ -Unterraum

<sup>4</sup>Natürlich hängt die Zusammensetzung dieser Zustände vom lokalen Wert des Magnetfelds und somit vom Ort  $Z$  ab. Wir werden aber für den Rest dieses Kapitels diese Abhängigkeit nicht mehr explizit in der Form  $|\alpha(Z)\rangle$  anschreiben, da dies für das Verständnis des Fahrplanmodells nicht notwendig ist und um die Notation so kurz und übersichtlich wie möglich zu halten.

<sup>5</sup>M. DeKieviet, private Diskussion.

<sup>6</sup> Im Zusammenhang mit der Aufspaltung der atomaren Energieniveaus in einem angelegten Magnetfeld unterscheidet man zwischen dem Zeeman-Bereich und dem Paschen-Back-Bereich. Der Zeeman-Bereich liegt für kleine Magnetfelder vor, wo die Kopplung des Bahndrehimpulses des Elektrons und seines Spin zum Gesamtdrehimpuls stärker ist als die Kopplung beider Drehimpulse an das angelegte Magnetfeld. Bei starken Magnetfeldern überwiegt dagegen die Kopplung der Einzeldrehimpulse des Elektrons an das Magnetfeld und man spricht vom Paschen-Back-Bereich. Im Breit-Rabi-Diagramm 3.5 erkennt man den Übergang zwischen beiden Bereichen z.B. an dem Übergang der Energie des Zustands  $|2\rangle$  von einer quadratischen zu einer linearen Feldabhängigkeit. Als kritisches Magnetfeld bezeichnen wir die (ungefähre) Grenze zwischen Zeeman- und Paschen-Back-Bereich.

Wählen wir nun  $\mathcal{B} = 2 \text{ mT}$ , so erhalten wir die Energien

$$E_{1,3}(2 \text{ mT}) \approx \pm 1 \cdot 10^{-7} \text{ eV}, \quad E_2(2 \text{ mT}) \approx 1 \cdot 10^{-9} \text{ eV} . \quad (3.84)$$

Weiterhin betrachten wir einen Strahl von Wasserstoffatomen mit einer mittleren Geschwindigkeit von  $\bar{v} = 2880 \text{ m/s}$ , d.h. kinetischer Energie  $E_{\text{kin}} = 0,025 \text{ eV}$ . Diese Parameter sind so gewählt, dass die resultierenden Diagramme einen guten Überblick über die physikalischen Vorgänge liefern. Ob sie sich für wirklich für Experimente eignen, spielt also im Moment keine Rolle für uns.

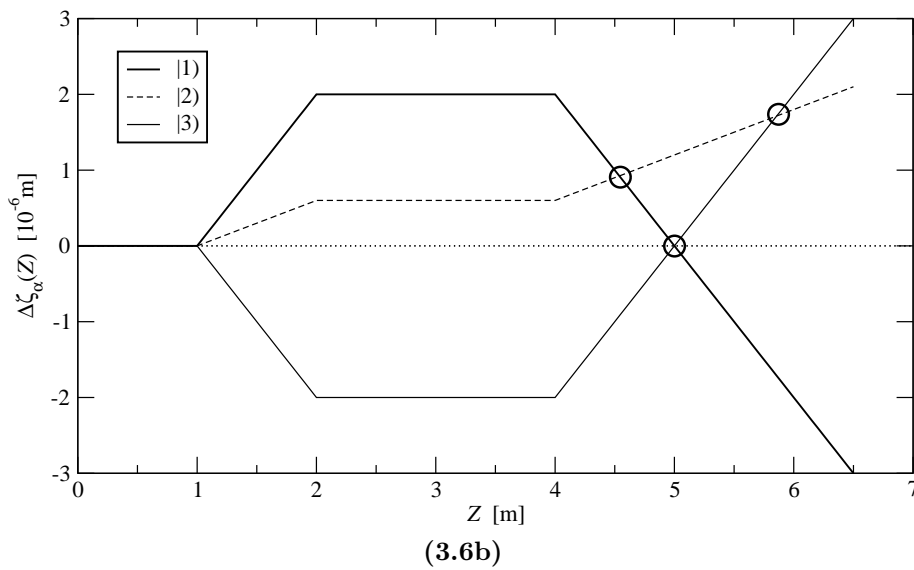
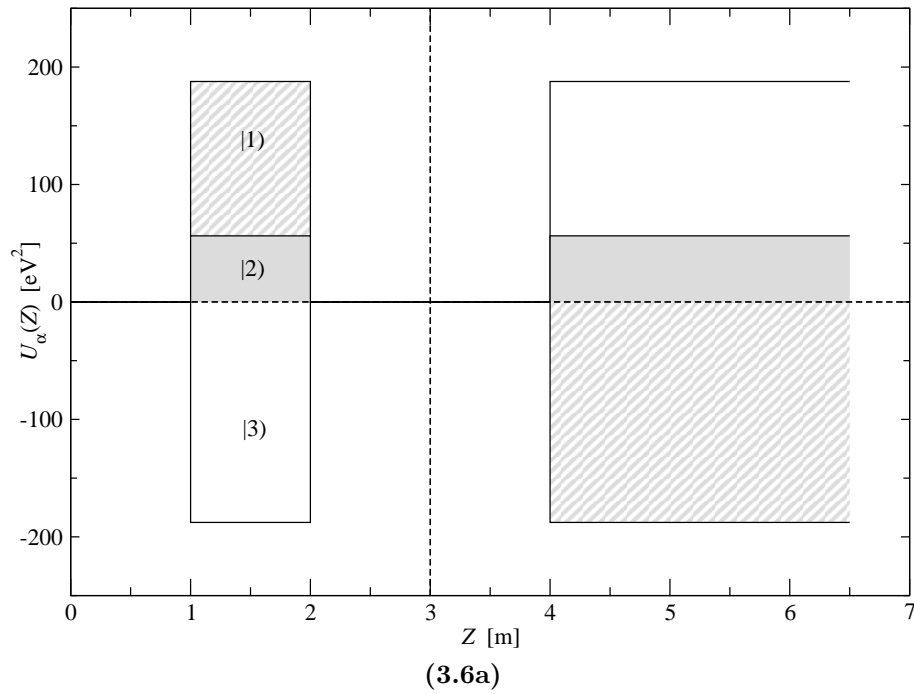
Die Näherung für kleine Potentiale ist mit den eben angegebenen Parametern sehr gut erfüllt, z.B. gilt  $E_1/E_{\text{kin}} = 4 \cdot 10^{-6}$ . In einem solchen Strahl haben die Atome eine Wellenzahl von  $\bar{k} = 3,4 \cdot 10^{10} / \text{m}$  und eine Wellenlänge  $\bar{\lambda} = 1,8 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ , d.h. für eine Breite von  $\sigma = 10^{-7} \text{ m} = 1800\bar{\lambda} \gg \bar{\lambda}/(4\pi)$  stellt das WKB-Wellenpaket nach (2.73) eine gute Näherung dar.

Nun wählen wir eine Magnetfeldkonfiguration, die aus zwei antiparallel gerichteten Feldern bestehen soll. Beide Felder wollen wir als stückweise konstant wählen und in Strahlrichtung orientieren. Das erste Feld erzeuge also einen Potentialwall im Bereich  $-2 \text{ m} \leq -1 \text{ m}$ , das zweite Feld wollen wir für  $z \geq 1 \text{ m}$  bis ins Unendliche ausgedehnt wählen (zur besseren Demonstration der Kreuzungspunkte).

An dieser Stelle sei ein wichtiges Detail angemerkt: Da laut Gl. (3.84), gemäß dem Breit-Rabi-Diagramm, die Energie  $E_2$  um den Faktor 100 kleiner als  $E_{1,3}$  ist, bewegt sich der Zustand  $|2\rangle$  praktisch frei durch die Felder. Für die Demonstration, die wir hier anstreben, erweist sich dieser Umstand als sehr ungeeignet, weshalb wir bis auf weiteres die Energie  $E_2$  um einen Faktor 30 verstärkt haben. Die resultierenden Potentiale  $U_\alpha(Z) = 2MV_\alpha(Z)$  können Abb. 3.6a entnommen werden.

In Abb. 3.6b ist der Fahrplan für diese Potentiale dargestellt, d.h. wir haben hier die in (3.78) definierten Differenzen  $\Delta\zeta_\alpha(Z)$  für die jeweiligen Wellenpakete zum freien Wellenpaket gegen die Ortskoordinate  $Z$  aufgetragen. Es sei daran erinnert, dass diese Abstände die durch die Geschwindigkeit des freien Teilchens dividierten Zeitdifferenzen  $\Delta T_\alpha(Z)$  aus (3.81) sind.

Im ersten Magnetfeld haben die Zustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  positive Potentiale und „verspäten“ sich gegenüber dem freien Wellenpaket, d.h. im Fahrplan tritt eine positive Abweichung auf. Zustand  $|3\rangle$  hat ein negatives Potential, so dass sein Wellenpaket einen Vorsprung ggü. dem freien Wellenpaket bekommt. Im zweiten Magnetfeld dreht sich die Situation für die Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  gerade um, während Zustand  $|2\rangle$  das gleiche Potential wie im ersten Feld spürt. Die sich hieraus ergebenden Kreuzungspunkte sind in Abb. 3.6b eingekreist. Würde man im zweiten Magnetfeld einen Detektor platzieren, so würde man an diesen Stellen Interferenz beobachten können, da je zwei Wellenpakete gleichzeitig auf den Detektor treffen und daher einen nichtverschwindenden Überlapp haben. Bei Verschiebung des Detektors würde man die ortsabhängige Oszillation der relativen



**Abbildung 3.6:** Die Potentiale  $U_\alpha(z) = 2mV_\alpha(z)$  für die Komponenten des polarisierten Zustands  $|1_x\rangle$ , dargestellt in 3.6a. Das Potential  $U_2(z)$  ist dabei um einen Faktor 30 ggü. dem realistischen Potential für Wasserstoff in einem Magnetfeld mit  $B = 2$  mT skaliert. In 3.6b ist der Fahrplan mit der daraus resultierenden Vorhersage für die Kreuzungspunkte der Schwerpunkte der einzelnen Wellenpakete gezeigt.

Phasen der beteiligten Wellenpakete sehen, sowie eine Änderung der Amplitude dieser Oszillation, die durch die Änderung des Überlapps entsteht.

Diese physikalische Überlegungen wollen wir im nächsten Abschnitt quantitativ mit den bisherigen Methoden untersuchen und das Kapitel mit der Berechnung des IABSE-Interferenz-Signals abschließen.

### 3.3.4 Die Berechnung des Interferenzsignals

Der atomare Gesamtzustand am Ort  $Z$  lautet gemäß (3.58) und (3.59) mit dem Polarisationszustand (3.82)

$$\begin{aligned} |\Psi(Z, t)\rangle &= \frac{1}{2}e^{i\phi_1(Z, t)}\varphi(\zeta_1(Z) - \tau(t))|1\rangle \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi_2(Z, t)}\varphi(\zeta_2(Z) - \tau(t))|2\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2}e^{i\phi_3(Z, t)}\varphi(\zeta_3(Z) - \tau(t))|3\rangle \end{aligned} \quad (3.85)$$

mit den WKB-Phasenwinkeln aus (3.60). Nun sei am Ort  $Z$  ein Detektor platziert, der den Anteil der ursprünglichen Polarisation im Zustand (3.85) misst, also den Zustand  $|\Psi(Z, t)\rangle$  auf  $|1_x\rangle$  projiziert. Die Wellenfunktion, die der Detektor messen wird, lautet damit

$$\begin{aligned} \Psi_{1x}(Z, t) &= \langle 1_x | \Psi(Z, t) \rangle \\ &= \frac{1}{4}e^{i\phi_1(Z, t)}\varphi(\zeta_1(Z) - \tau(t)) \\ &\quad + \frac{1}{2}e^{i\phi_2(Z, t)}\varphi(\zeta_2(Z) - \tau(t)) \\ &\quad + \frac{1}{4}e^{i\phi_3(Z, t)}\varphi(\zeta_3(Z) - \tau(t)) \end{aligned} \quad (3.86)$$

und die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \rho_{1x}(Z, t) &= |\Psi_{1x}(Z, t)|^2 \\ &= \frac{1}{16} \left| \varphi(\zeta_1(Z) - \tau(t)) + 2e^{i\phi_{2,1}(Z)}\varphi(\zeta_2(Z) - \tau(t)) + e^{i\phi_{3,1}(Z)}\varphi(\zeta_3(Z) - \tau(t)) \right|^2. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Dabei haben wir einen globalen Phasenfaktor  $\exp\{i\phi_1(Z, t)\}/4$  aus dem Betragsquadrat herausgezogen und die Phasenwinkeldifferenzen

$$\begin{aligned} \phi_{\beta, \alpha}(Z) &= \phi_\beta(Z, t) - \phi_\alpha(Z, t) \\ &= \int_{Z_0}^Z dZ' \left( \sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\beta(Z')} - \sqrt{\bar{k}^2 - 2MV_\alpha(Z')} \right). \end{aligned} \quad (3.88)$$

eingeführt.

Ein IABSE-Experiment misst stets den zeitlich integrierten Fluss von Atomen. Dies entspricht dem Zählen von Atomen, die vom Detektor gemessen werden und sich somit (in unserem Beispiel) im Zustand  $|1_x\rangle$  befinden, während eines festgelegten Zeitintervalls. Bezogen auf die Gesamtzahl von Atomen, die am Detektor während dieses Zeitintervalls angekommen sind, ergibt sich dann die Wahrscheinlichkeit  $P_{1x}(Z)$  dafür, dass sich ein Atom am Detektorort im Zustand  $|1_x\rangle$  befindet. In dem eindimensionalen Fall, den wir beim IABSE stets betrachten, ist der Fluss  $\Phi_{1x}(Z)$  stets identisch mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_{1x}(Z, t)$ , für die wir in diesem Abschnitt die Näherung

$$\Phi_{1x}(Z, t) := j_{1x}(Z, t) \approx \frac{\bar{k}}{M} \rho_{1x}(Z, t) . \quad (3.89)$$

machen. Da wir uns den Detektor im Magnetfeld platziert denken, haben die Wellenpakete eigentlich unterschiedliche lokale Geschwindigkeiten. Für die sehr kleinen Magnetfelder, die wir in diesem Abschnitt betrachten, sollte (3.89) aber eine sehr gute Näherung darstellen. Eine korrekte Definition der Wahrscheinlichkeitsstromdichte wird in Kap. 6 gegeben.

Das IABSE-Signal, dass wir nun berechnen wollen lautet also

$$P_{1x}(Z) = \int dt \Phi_{1x}(Z, t) = \frac{\bar{k}}{M} \int dt \rho_{1x}(Z, t) . \quad (3.90)$$

An dieser Stelle wollen wir noch eine Anmerkung zum Gesamtfluss der Atome machen. Dieser ergibt sich in der Näherung aus (3.89) zu

$$\Phi_{\text{ges}}(Z, t) := \frac{\bar{k}}{M} \langle \Psi(Z, t) | \Psi(Z, t) \rangle = \frac{\bar{k}}{M} \sum_{\alpha=1,2,3} \hat{\chi}_{\alpha}^2 \varphi(\zeta_{\alpha}(Z) - \tau(t))^2 . \quad (3.91)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Atom am Detektor ankommt ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} P_{\text{ges}}(Z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\bar{k}}{M} \sum_{\alpha=1,2,3} \hat{\chi}_{\alpha}^2 \varphi(\zeta_{\alpha}(Z) - \tau(t))^2 \\ &= \sum_{\alpha=1,2,3} \hat{\chi}_{\alpha}^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \varphi(\zeta_{\alpha}(Z) - \tau)^2 \\ &= \sum_{\alpha=1,2,3} \hat{\chi}_{\alpha}^2 \\ &= 1 \end{aligned} \quad (3.92)$$

und ist wie zu erwarten gleich Eins.

Verwenden wir nun die Dichte  $\rho_{1x}(Z, t)$  aus (3.87) und berechnen (3.90), so erhalten wir

nach Substitution  $\frac{\bar{k}}{m}t \rightarrow \tau$  und anschließender Translation/Spiegelung  $\tau \rightarrow \zeta_1(Z) - \tau$

$$P_{1x}(Z) = \frac{1}{16} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left| \varphi(\tau) + 2e^{i\phi_{2,1}(Z)}\varphi(\zeta_2(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) + e^{i\phi_{3,1}(Z)}\varphi(\zeta_3(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) \right|^2. \quad (3.93)$$

Nach Ausmultiplikation des Betragsquadrats erhalten wir weiter

$$\begin{aligned} P_{1x}(Z) = \frac{1}{16} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau & \left( \varphi^2(\tau) + 4\varphi^2(\zeta_2(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) + \varphi^2(\zeta_3(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) \right. \\ & + 4\cos(\phi_{2,1}(Z))\varphi(\tau)\varphi(\zeta_2(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) \\ & + 2\cos(\phi_{3,1}(Z))\varphi(\tau)\varphi(\zeta_3(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) \\ & \left. + 4\cos(\phi_{3,2}(Z))\varphi(\zeta_2(Z) - \zeta_1(Z) + \tau)\varphi(\zeta_3(Z) - \zeta_1(Z) + \tau) \right), \end{aligned} \quad (3.94)$$

wobei wir hier nur reelle Einhüllende  $\varphi(\zeta)$  zugelassen haben. Die ersten drei Summanden in der Klammer ergeben nach der Integration die Zahl sechs, d.h. wir erhalten

$$P_{1x}(Z) = \frac{3}{8} + \frac{1}{4}\cos(\phi_{2,1}(Z))I_{2,1}(Z) \quad (3.95)$$

$$+ \frac{1}{8}\cos(\phi_{3,1}(Z))I_{3,1}(Z) \quad (3.96)$$

$$+ \frac{1}{4}\cos(\phi_{3,2}(Z))I_{3,2}(Z), \quad (3.97)$$

wobei wir die Integralfunktion

$$I_{\alpha,\beta}(Z) := \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \varphi(\tau)\varphi(\zeta_\alpha(Z) - \zeta_\beta(Z) + \tau) \quad (3.98)$$

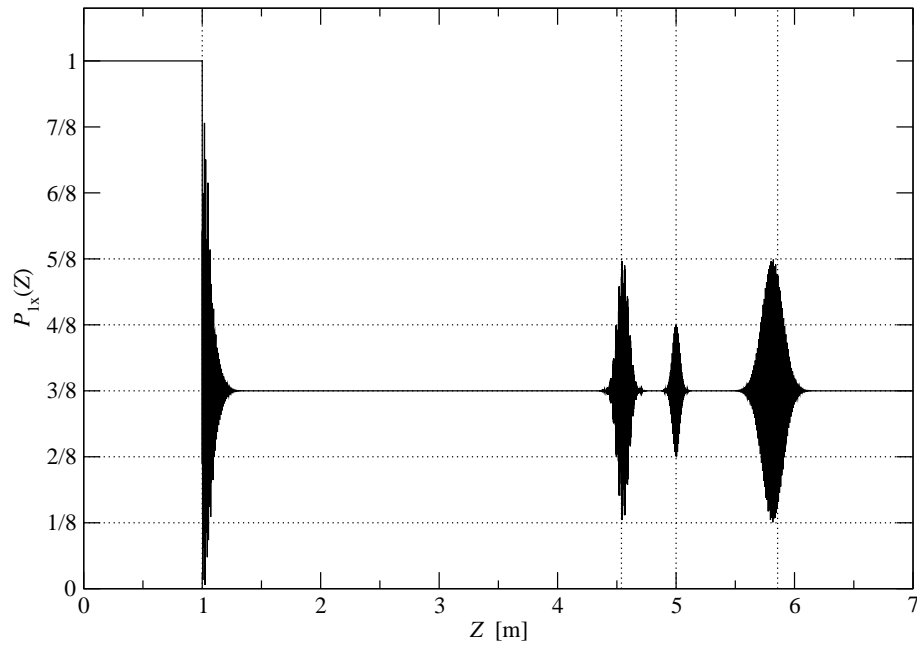
verwendet haben. Der Wert von  $I_{\alpha,\beta}(Z)$  ist proportional zum Überlapp der Wellenpakete der Komponenten mit den Indizes  $\alpha$  und  $\beta$ . Dieser Überlapp wird dann an genau der Stelle  $Z$  auf der Strahlachse am größten, wo die Differenz  $\zeta_\alpha(Z) - \zeta_\beta(Z)$  verschwindet, also wenn beide Wellenpakete exakt gleichzeitig am Detektor eintreffen.

In Abb. 3.7a ist die numerisch berechnete Ortsabhängigkeit des integrierten Flusses  $P_{1x}(Z)$  aus Gl. (3.95) dargestellt. Es wurden die gleichen Parameter wie für den in Abb. 3.6 gezeigten Fahrplan verwendet, sowie das in am Anfang von Abschnitt 3.3.3 (siehe Abb. 2.3) eingeführte, um Null zentrierte Gaußsche Wellenpaket

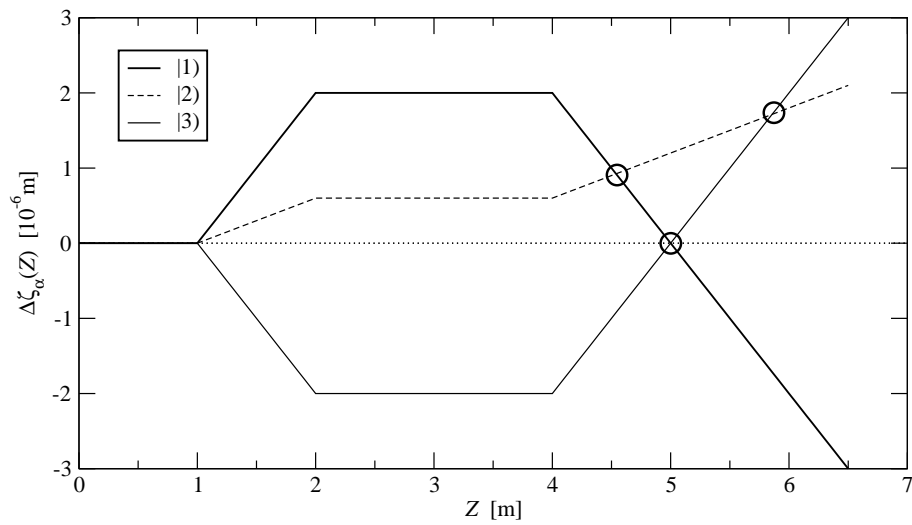
$$\varphi(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\pi}} \exp\left\{-\frac{\zeta^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad (3.99)$$

hier mit einer Breite  $\sigma = 10^{-7}$  m. Man erkennt in Abb. 3.7a folgendes:





(3.7a)



(3.7b)

**Abbildung 3.7:** Abb. 3.7a zeigt den numerisch berechneten integrierte Fluss  $P_{1x}(Z)$  der Atome, die sich im Zustand  $|1_x\rangle$  befinden in Abhängigkeit des Ortes  $Z$  auf der Strahlachse. Das in 3.7b dargestellte Signal steht in direktem Zusammenhang mit der Bewegung der Schwerpunkte. Man beachte, dass auch hier für das zweite Wellenpaket ein Potential verwendet wurde, das um den Faktor 30 gegenüber dem realistischen Potential skaliert ist. Verwendet wurden weiter Wellenpakete mit einer Breite von  $\sigma = 10^{-7}$  m und mit mittlerer Geschwindigkeit  $\bar{v} = 2880$  m/s.

- (i) Vor dem Potential bewegen sich alle Wellenpakete gleich, d.h. der Polarisationszustand  $|1_x\rangle$  des Atoms bleibt erhalten. Mit Beginn der Potentiale laufen die Zustände auseinander und es findet eine Oszillation der relativen Phase statt (die Spinrotation). Der Fluss pendelt sich schließlich beim konstanten Wert  $3/8$  ein. Hier gibt es keinen Überlapp zwischen den Wellenpaketen. Im weiteren Verlauf auf der Strahlachse treten schließlich drei Spinecho-Signale auf, verursacht durch die Oszillation der relativen Phase je zweier Wellenpakete und sichtbar gemacht durch deren Überlapp.
- (ii) Die Amplituden der unterschiedlichen Signale entsprechen den Kosinus-Vorfaktoren aus (3.95).
- (iii) Die Breite der Signale hängt vom Schnittwinkel der Schwerpunktsbewegung der beteiligten Wellenpakete aus Abb. 3.7 ab. Ein kleiner Winkel bedeutet, dass der (zeitliche) Abstand (des Eintreffens) der Schwerpunkte nur langsam mit dem betrachteten Ort auf der Strahlachse variiert, d.h. der Überlapp der Wellenpakete ist über einen längeren Bereich auf der Strahlachse groß. Bei einem großen Winkel ist der Überlapp nur sehr nahe am Kreuzungspunkt groß genug, um das Echo-Signal sichtbar zu machen.
- (iv) Die Frequenz der Oszillation hängt von der Potentialdifferenz der beteiligten Wellenpakete ab. Dies ist in Abb. 3.7 zwar nicht zu erkennen, wird aber weiter unten an einem geeigneteren Beispiel (siehe Abb. 3.8) noch gezeigt.

Nun können wir auch besser die Skalierung von  $V_2(z)$  um den Faktor 30 begründen: Hätten wir sie nicht vorgenommen, so würden die Kreuzungspunkte wesentlich dichter beisammen liegen und die drei Signale würden miteinander verschmelzen. Effektiv hätte man dann an den Kreuzungspunkten den Ausgangszustand (fast) wieder hergestellt. Eine Auflösung der drei Signale wäre dann nur bei sehr viel schmalere Wellenpaketen möglich.

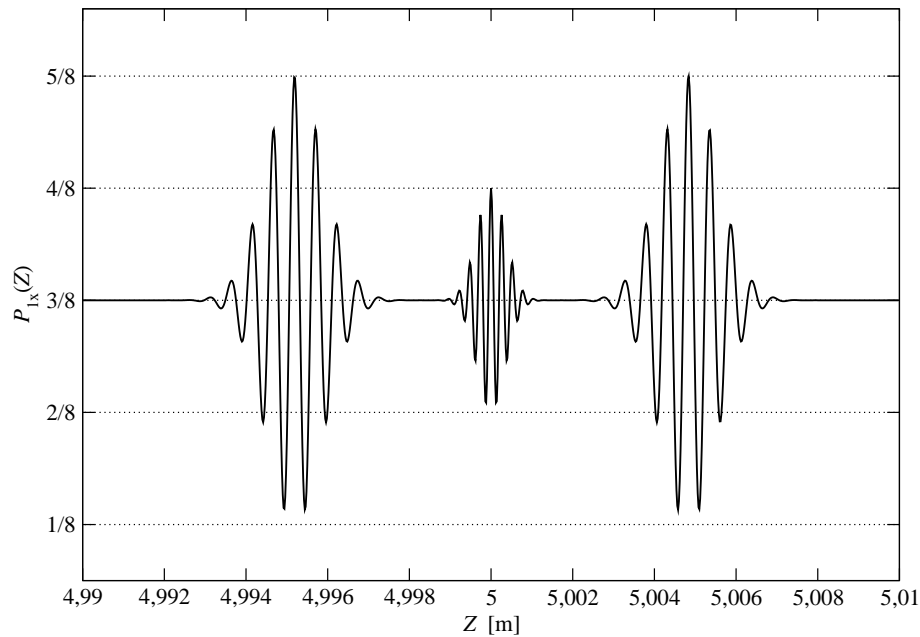
Schließlich sei gesagt, dass Abb. 3.7 der Abb. 3.12 auf S. 56 in [13] vom Prinzip her entspricht. Dort wurden allerdings korrekte Energieverhältnisse verwendet, die Abbildung dann jedoch teilweise reskaliert, so dass die Verhältnisse der Schwerpunktsbewegungen zueinander, sowie die Lage der Kreuzungspunkte und die Form der Spinechosignale, täuschen<sup>7</sup>.

Der Vollständigkeit halber wollen wir nun aber noch ein Beispiel für das Fahrplanmodell bei realistischen Energieverhältnissen angeben. Wir haben für ein magnetisches Feld von  $\mathcal{B} = 0.5 \text{ mT}$  bei veränderten Strahlenenergien (siehe Bildunterschrift des Signals) die Berechnungen erneut durchgeführt und das Ergebnis in Abb. 3.8 dargestellt.

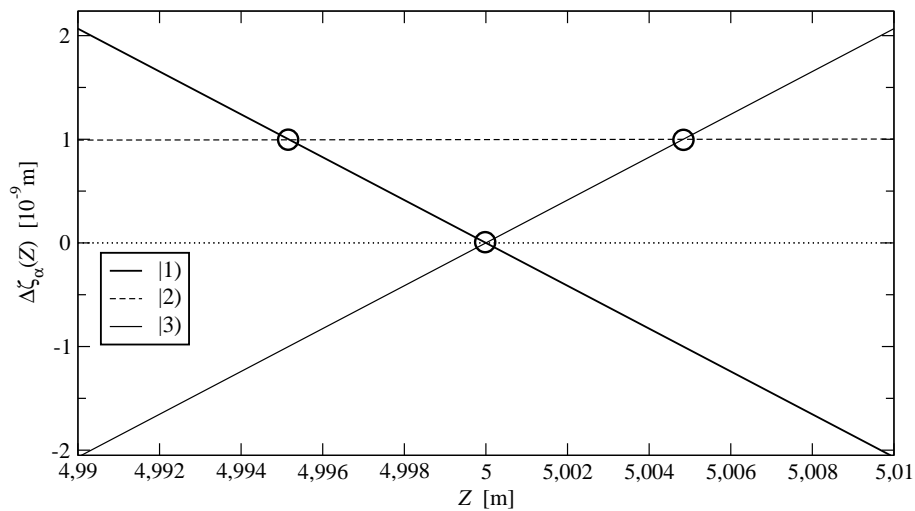
Aufgrund des geringeren Potentials für den Zustand  $|2\rangle$  liegen die Kreuzungspunkte nun sehr dicht beieinander. Die Abstände der Wellenpakete zwischen den Kreuzungspunkten sind daher sehr klein. Durch das insgesamt sehr geringe Potential unterscheiden sich die

---

<sup>7</sup>M. DeKieviet, private Diskussion.



(3.8a)



(3.8b)

**Abbildung 3.8:** Ein Beispiel für das Fahrplanmodell bei realistischen Potentialen. Die Potentiale nach Gl. (3.83) entsprechen nun einem Magnetfeld von  $\mathcal{B} = 0.5 \text{ mT}$ , das von Wasserstoff mit einem Impuls bzw. einer Wellenzahl von  $\bar{k} = 11463 \text{ eV} \hat{=} 5,8 \cdot 10^{10} / \text{m}$  und einer de-Broglie-Wellenlänge von  $\bar{\lambda} = 1,08 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  durchquert wird. Dies entspricht einer Geschwindigkeit der Atome von  $v = 3661 \text{ m/s}$ . Die Breite der Wellenpakete beträgt  $\sigma \approx 10^{-10} \text{ m}$ , was nicht mehr so gut die Bedingung (2.73) erfüllt. In 3.8a kann man nun die korrekten Verhältnisse der Breiten und der Wellenlängen der einzelnen Signale zueinander erkennen. In 3.8b sieht man, dass die Kreuzungspunkte nun viel dichter beisammen liegen, als bei Abb. 3.7.

Schwerpunktsgeschwindigkeiten nur gering, was dazu führt, dass die Pakete über eine längere Strecke hinweg einen signifikanten Überlapp haben.

Um zu erreichen, dass stets höchstens zwei Wellenpakete einen signifikanten Überlapp haben, mussten wir für das Beispiel eine sehr geringe Breite der Wellenpakete von  $\sigma = 10^{-10}$  m wählen, was bei dem verwendeten Wert für  $\bar{k}$  etwa eine Größenordnung größer als  $1/(2\bar{k})$  ist. Die von Gl. (2.73) geforderte Bedingung  $\sigma \gg 1/(2\bar{k})$  ist hier mit  $\sigma \approx 12/(2\bar{k})$  immer noch recht gut erfüllt.

Man sieht in Abb. 3.8a, dass die äußeren Signale, bedingt durch die identischen Schnittwinkel in Abb. 3.8b, die gleiche Breite haben. Da das Potential für |2) sehr nahe bei Null liegt und somit die Differenz zu den Potentialen von |1) und |3) praktisch identisch ist, haben diese Signale auch die gleiche Wellenlänge. Doppelt so groß ist der Unterschied zwischen den Potentialen von |1) und |3), was die halb so große Wellenlänge des mittleren Signals erklärt. Diese beiden Zustände haben in Abb. 3.8b auch den doppelten Schnittwinkel verglichen mit den äußeren Kreuzungspunkten, daher ist das mittlere Signal auch nur halb so breit wie die äußeren Signale.

### 3.3.5 Abschließende Diskussion

Wie in der Einleitung zu diesem Abschnitt auf Seite 37 behauptet, haben wir hier tatsächlich gezeigt, dass wir in der Lage sind, sowohl das Fahrplanmodell als auch ein einfaches IABSE-Signal mit den bisherigen Methoden zu berechnen. Das von uns berechnete Signal aus Abb. 3.8 mit realistischen Parametern kann direkt verglichen werden mit dem theoretisch berechneten Signal aus [13], Abb. 3.8, S. 50<sup>8</sup>. Ebenso kann der Demonstrations-Fahrplan aus Abb. 3.7 direkt verglichen werden mit dem qualitativen Beispiel aus [13], Abb. 3.12, S. 56 (Der Fahrplan ist dort allerdings relativ zu unserem Beispiel vertikal gespiegelt dargestellt).

Unsere Theorie erlaubt uns nun, die Grenzen des bisherigen Fahrplanmodells zu definieren. Die WKB-Wellenpakete, die hier verwendet wurden, gelten nur unter Verwendung der Näherungen (W1)-(W3) von Seite 20, d.h. langsam variierende Potentiale (W1), die im Vergleich zur kinetischen Energie sehr gering sind (W3), sowie sehr breite Wellenpakete (W2). Einzig (W3) dürfte für alle IABSE-Experimente, die wir in der vorliegenden Arbeit betrachten wollen, eine gute Näherung sein. Die Breite der Wellenpakete im Ortsraum kann aber durchaus sehr schmal sein, wie im realistischen Beispiel gezeigt, so dass die Näherung (W2) nicht mehr gut erfüllt ist und wir Dispersion berücksichtigen müssten. Noch deutlicher könnte die Näherung (W1) verletzt sein, nämlich wenn wir nicht-adiabatische Verhältnisse betrachten. Insbesondere bei der Betrachtung von P-verletzenden Rotationen der Polarisation von Atomen in elektrischen Feldern, wie sie

---

<sup>8</sup> Auch hier wollen wir auf die rätselhafte, aber rein zufällige Übereinstimmung in den Nummern der Abbildungen 3.8 hinweisen.

z.B. in [31] vorgeschlagen wurden, benötigt man die nicht-adiabatische Erzeugung neuer Wellenpakete, die zu atomaren Zuständen gehören, die gerade nicht im Anfangszustand vertreten waren. Es stellt sich dann die Frage, wie die Wellenpakete der verschiedenen atomaren Zustände im nicht-adiabatischen Fall miteinander wechselwirken. Desweiteren benötigen wir gerade für die Untersuchung P-verletzender Effekte in Atomen metastabile Zustände [32, 31, 33, 34, 36]. Bei einer Beschreibung des Atoms als orts- und zeitabhängiges Wellenpaket ist es nicht sofort klar, wie dieser Zerfall formal zu implementieren ist.

Wir brauchen also eine grundlegendere, exakte Theorie des LABSE. Im nächsten Kapitel werden wir daher eine Methode zur prinzipiellen Berechnung der exakten Lösung der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung entwickeln. Dies erlaubt uns dann, einen quantitativen Vergleich zwischen der WKB-Lösung und der Charakteristiken-Lösung anzustellen. In Kapitel 5 werden wir diese Methode dann zur Behandlung komplexer skalare Potentiale verwenden. Hier werden wir sehen, wie der Zerfall eines instabilen Teilchen, dass durch das Wellenpaket repräsentiert wird, formal zu berücksichtigen ist.

Die Übertragung der Methode auf matrixwertige Potentiale in Kapitel 6 bringt uns dann endlich an das angestrebte Ziel der vorliegenden Arbeit, nämlich die vollständige theoretische Beschreibung eines LABSE-Experiments mit statischen elektrischen und magnetischen Feldern.



# Kapitel 4

---

## Die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung mit skalarem Potential

---

### 4.1 Ein kurzer Rückblick auf die Charakteristiken- und die WKB-Lösung

In Abschnitt 2.2 haben wir eine Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung mit Hilfe der Methode der Charakteristiken gefunden. Mit dem Ansatz

$$\Psi(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \bar{k} z \right\} A(z, t) \quad (4.1)$$

erhielten wir dort für den Amplitudenteil der Wellenfunktion im Falle eines skalaren Potentials  $V(z)$

$$A(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{m}{\bar{k}} \int_{z - \frac{\bar{k}}{m}(t-t_0)}^z dz' V(z') \right\} \tilde{\varphi} \left( z - \frac{\bar{k}}{m}(t-t_0) \right) . \quad (4.2)$$

In Abschnitt 2.3 fanden wir mit Hilfe der WKB-Näherung für den Ansatz

$$\Psi(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} A(z, t) \quad (4.3)$$

die Lösung

$$\Psi(z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \quad (4.4)$$

mit den in (2.45) definierten Koordinatenfunktionen

$$\zeta(z) := \int_{z_0}^z dz' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} , \quad \tau(t) := \frac{\bar{k}}{m} t . \quad (4.5)$$

Beide Lösungen sind vom gleichen Typ, nämlich ein Produkt aus Phasenfaktor und Amplitudenfunktion,

$$\Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} A(z, t) , \quad (4.6)$$

mit jedoch unterschiedlichen Phasenwinkeln  $\phi(z, t)$ . Ebenso sind beide Wellenfunktionen Lösungen der Schrödinger-Gleichung bei Vernachlässigung der zweiten Ortsableitungen, d.h. unter der Näherung

$$\partial_z^2 \phi(z, t) \approx 0, \quad \partial_z^2 A(z, t) \approx 0 . \quad (4.7)$$

Der Charakteristiken-Lösung sieht man direkt an, dass  $\partial_z^2 \phi(z, t) = 0$  identisch erfüllt ist, während dies für die WKB-Lösung nur näherungsweise (im Rahmen der WKB-Näherung) gilt. Es handelt sich bei dem Charakteristiken-Phasenwinkel<sup>1</sup> damit wohl um eine Übersimplifikation, die im WKB-Fall nicht gemacht wurde und die sich in entscheidender Weise auf das Ergebnis auswirkt. Immerhin konnte die WKB-Lösung in Bezug auf die Schwerpunktsbewegung physikalisch sehr gut interpretiert werden, während dies offensichtlich bei der Charakteristiken-Lösung nicht der Fall war (siehe Diskussion am Ende von Abschnitt 2.3.2).

Die Methode zur Berechnung der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung in Form einer Reihenentwicklung, die wir im nächsten Abschnitt entwickeln wollen, wird es uns erlauben, beide Näherungslösungen quantitativ zu vergleichen.

## 4.2 Die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit skalarem Potential

Wir werden nun eine Lösung der Schrödinger-Gleichung mit skalarem Potential für einen Ansatz der Form (4.6) berechnen. Wir werden zunächst die Schrödinger-Gleichung für

---

<sup>1</sup>Hiermit wollen wir im folgenden den Phasenwinkel bezeichnen, den wir bei der Lösung mit der Methode der Charakteristiken verwendet haben.



vorgegebenen Phasenwinkel  $\phi(z, t)$  in geeigneter Weise umschreiben und danach mit Hilfe geeigneter Green-Funktionen in eine Integralgleichung umwandeln, die wir dann iterativ lösen können.

### 4.2.1 Umschreiben der Schrödinger-Gleichung

Das Einsetzen des Ansatzes (4.6),

$$\Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} A(z, t) ,$$

in die Schrödinger-Gleichung

$$(\partial_z^2 - 2mV(z) + 2mi\partial_t)\Psi(z, t) = 0 \quad (4.8)$$

liefert (siehe Gl. (2.37))

$$\begin{aligned} 0 = & (i\partial_z^2\phi(z, t) - (\partial_z\phi(z, t))^2 - 2mV(z) - 2m\partial_t\phi(z, t))A(z, t) \\ & + 2i(\partial_z\phi(z, t))(\partial_z A(z, t)) + \partial_z^2 A(z, t) + 2mi\partial_t A(z, t) . \end{aligned} \quad (4.9)$$

Wir können nun für  $\phi(z, t)$  jeweils den WKB- oder den Charakteristiken-Phasenwinkel wählen, um eine Gleichung für die Amplitudenfunktion  $A(z, t)$  zu erhalten.

### Verwendung des WKB-Phasenwinkels

Wählen wir zunächst den WKB-Phasenwinkel<sup>2</sup>, also nach (2.43)

$$\phi(z, t) = \phi_{\text{WKB}}(z, t) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + S(z) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \int_{z_0}^z dz' k(z') . \quad (4.10)$$

Hier haben wir die lokale Wellenzahl

$$k(z) := \partial_z S(z) = \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z)} \quad (4.11)$$

eingeführt. Die Schrödinger-Gleichung (4.9) lautet dann nach Berechnung aller Ableitungen von  $\phi(z, t)$ :

$$\left( \partial_z^2 + 2ik(z)\partial_z - k^2(z) - i\frac{m\partial_z V(z)}{k(z)} - 2mV(z) + \bar{k}^2 + 2im\partial_t \right) A(z, t) = 0 . \quad (4.12)$$

---

<sup>2</sup> Wir bezeichnen den in Gl. (2.47) definierten Anteil  $S_k(z)$  des WKB-Phasenwinkels im Folgenden nur noch mit  $S(z)$  und verstehen darunter den WKB-Anteil für die mittlere Wellenzahl,  $S_{\bar{k}}(z)$ .

---

Nach Definition der lokalen Wellenzahl gilt  $\bar{k}^2 - k^2(z) = 2mV(z)$ , also folgt

$$\left( \partial_z^2 + 2ik(z)\partial_z - i\frac{m\partial_z V(z)}{k(z)} + 2im\partial_t \right) A(z, t) = 0 . \quad (4.13)$$

Nun gehen wir über zu den neuen Koordinaten  $\zeta(z)$  und  $\tau(t)$  aus (4.5), denen wir im Zusammenhang mit der WKB-Lösung bereits begegnet sind, d.h.

$$\zeta(z) = \int_{z_0}^z dz' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} , \quad \tau(t) = \frac{\bar{k}}{m} t .$$

Es gilt

$$\partial_z = \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\bar{k}}{k(z)} \frac{\partial}{\partial \zeta} = \frac{\bar{k}}{k(z)} \partial_\zeta \quad (4.14)$$

und

$$\partial_t = \frac{\bar{k}}{m} \partial_\tau . \quad (4.15)$$

Mit der Amplitudenfunktion in den neuen Koordinaten  $\zeta$  und  $\tau$ ,

$$B(\zeta(z), \tau(t)) := A(z, t) \quad (\text{bzw. } B(\zeta, \tau) = A(z(\zeta), t(\tau))) \quad (4.16)$$

können wir die Schrödinger-Gleichung (4.13) umschreiben und erhalten

$$2i\bar{k}(\partial_\zeta + \partial_\tau) B(\zeta, \tau) + \left( \partial_z^2 - i\frac{m\partial_z V(z)}{k(z)} \right) B(\zeta, \tau) = 0 . \quad (4.17)$$

Die zweite Ortsableitung der Amplitude berechnet sich zu

$$\begin{aligned} \partial_z^2 B(\zeta, \tau) &= \partial_z \frac{\bar{k}}{k(z)} \partial_\zeta B(\zeta, \tau) \\ &= -\frac{\bar{k}(\partial_z k(z))}{k^2(z)} \partial_\zeta B(\zeta, \tau) + \frac{\bar{k}^2}{k^2(z)} \partial_\zeta^2 B(\zeta, \tau) \\ &= \frac{\bar{k}m(\partial_z V(z))}{k^3(z)} \partial_\zeta B(\zeta, \tau) + \frac{\bar{k}^2}{k^2(z)} \partial_\zeta^2 B(\zeta, \tau) , \end{aligned} \quad (4.18)$$

womit sich (4.17) schließlich in die Form

$$(\partial_\tau + \partial_\zeta) B(\zeta, \tau) = (\hat{L}_{\text{WKB}} B)(\zeta, \tau) \quad (4.19)$$

bringen lässt. Dabei ist  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  der für die Wahl des WKB-Phasenwinkels charakteristische Differentialoperator

$$\hat{L}_{\text{WKB}} = \frac{i}{2\bar{k}} \left[ -i \left( \frac{m}{k(z)} \partial_z V(z) \right) + \frac{m\bar{k}}{(k(z))^3} (\partial_z V(z)) \partial_\zeta + \frac{\bar{k}^2}{(k(z))^2} \partial_\zeta^2 \right] . \quad (4.20)$$

### Verwendung des Charakteristiken-Phasenwinkels

Wir führen nun dieselbe Rechnung für den Charakteristiken-Phasenwinkel

$$\phi(z, t) = \phi_C(z, t) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \bar{k}z \quad (4.21)$$

durch. Die Schrödinger-Gleichung (4.9) lautet dann nach Berechnung aller Ableitungen von  $\phi(z, t)$

$$(2i\bar{k}\partial_z + \partial_z^2 - 2mV(z) + 2im\partial_t) A(z, t) = 0 . \quad (4.22)$$

Auch hier führen wir die Variable  $\tau$  ein, lassen die Ortskoordinate  $z$  aber unberührt. Mit dem für den Charakteristiken-Phasenwinkel typischen Differentialoperator

$$\hat{L}_C = \frac{i}{2\bar{k}} (\partial_z^2 - 2mV(z)) \quad (4.23)$$

lautet die Schrödinger-Gleichung für die Funktion

$$B(z, \tau(t)) = A(z, t) \quad (4.24)$$

dann schließlich

$$(\partial_z + \partial_\tau) B(z, \tau) = (\hat{L}_C B)(z, \tau) . \quad (4.25)$$

### 4.2.2 Aufstellen und Lösen der Integralgleichung

Die beiden zu lösenden Schrödinger-Gleichungen (4.19), (4.25) sind sowohl im WKB- als auch im Charakteristiken-Fall vom gleichen Typ, nämlich

$$(\partial_\zeta + \partial_\tau) B(\zeta, \tau) = (\hat{L} B)(\zeta, \tau) . \quad (4.26)$$

Im Charakteristiken-Fall ist lediglich  $\zeta = z$  zu setzen, im WKB-Fall ist  $\zeta$  wie in (4.5) definiert. In beiden Fällen ist für  $\hat{L}$  der entsprechende Differentialoperator  $\hat{L}_C$  bzw.  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  zu verwenden.

Um (4.26) in eine Integralgleichung umschreiben zu können, benötigen wir eine Greensche Funktion des Operators auf der linken Seite der Gleichung, für die

$$(\partial_\zeta + \partial_\tau) G(\zeta, \tau) = \delta(\zeta) \delta(\tau) \quad (4.27)$$

erfüllt sein muss. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass

$$G(\zeta, \tau) = \Theta(\zeta + \tau) \delta(\zeta - \tau) \quad (4.28)$$

eine mögliche Lösung der Gl. (4.27) ist. Diese Funktion ist in der  $(\zeta, \tau)$ -Ebene nur auf der Winkelhalbierenden ( $\zeta = \tau$ ) im I. Quadranten von Null verschieden (also für  $\zeta, \tau \geq 0$ ) und entspricht somit einer retardierten Green-Funktion.

Die Gl. (4.26) kann damit in eine Integral-Gleichung umgewandelt werden:

$$B(\zeta, \tau) = \tilde{B}_0(\zeta - \tau) + \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta' \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' G(\zeta - \zeta', \tau - \tau') (\hat{L}B)(\zeta', \tau') . \quad (4.29)$$

Hierbei ist  $\tilde{B}_0(\zeta - \tau)$  eine beliebige Funktion die nur von der Kombination  $\zeta - \tau$  der beiden Koordinaten abhängt. Jede solche Funktion ist automatisch eine Lösung der homogenen Gleichung

$$(\partial_\zeta + \partial_\tau) \tilde{B}_0(\zeta - \tau) = 0 . \quad (4.30)$$

Durch Einsetzen der Green-Funktion (4.28) ergibt sich

$$B(\zeta, \tau) = \tilde{B}_0(\zeta - \tau) + \int_{-\infty}^{\zeta} d\zeta' (\hat{L}B)(\zeta', \tau') \big|_{\tau'=\tau-\zeta+\zeta'} . \quad (4.31)$$

In dem Integral ist zunächst der Operator  $\hat{L}$  auf die Funktion  $B(\zeta', \tau')$  anzuwenden, danach ist  $\tau' = \tau - \zeta + \zeta'$  zu setzen und schließlich ist die Integration auszuführen. Bei (4.31) handelt es sich um die formal exakte Lösung der Gleichung (4.26), wobei man durch iteratives Einsetzen von  $B(\zeta, \tau)$  im Integral eine Reihenentwicklung für die Lösung bekommt. Betrachtet man das Integral jedoch genauer, so stellt man fest, dass es divergent ist, was wir am folgenden Beispiel klar machen wollen. Nehmen wir z.B. den Operator  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  aus (4.20) und betrachten den dort enthaltenen Beitrag  $(\bar{k}^2/k^2(z))\partial_\zeta^2$  (neben dem konstanten Faktor  $i/2\bar{k}$ ). Dieser führt im Integrand von (4.31) in erster Ordnung zu

$$\int_{-\infty}^{\zeta} d\zeta' \frac{\bar{k}^2}{k^2(z(\zeta'))} \tilde{B}_0''(\zeta' - \tau') \big|_{\tau'=\tau-\zeta+\zeta'} = \tilde{B}_0''(\zeta - \tau) \int_{-\infty}^{\zeta} d\zeta' \frac{\bar{k}^2}{k^2(z(\zeta'))} . \quad (4.32)$$

Da auf der rechten Seite der Gleichung der Integrand bei den sehr kleinen Potentialen, die wir hier betrachten, für alle  $z$  nahe bei Eins liegt, divergiert das uneigentliche Integral und somit das gesamte Integral aus (4.31).

Dieses Problem kann man durch geschickte Wahl der homogenen Lösung  $\tilde{B}_0(\zeta - \tau)$  aus der Welt schaffen, z.B.

$$\tilde{B}_0(\zeta - \tau) = \varphi(\zeta - \tau) - \int_{-\infty}^{\zeta-\tau} d\zeta' (\hat{L}B)(\zeta', \tau') \big|_{\tau'=\tau-\zeta+\zeta'} . \quad (4.33)$$

Durch die Wahl der Integralobergrenze  $\zeta - \tau$  stellen wir sicher, dass (4.33) immer noch eine homogene Lösung der Gl. (4.26) ist. Wir beseitigen also die Divergenz im Integral in (4.31) durch eine divergente homogene Lösung.

Es verbleibt in (4.31) noch

$$B(\zeta, \tau) = \varphi(\zeta - \tau) + \int_{\zeta - \tau}^{\zeta} d\zeta' (\hat{L}B)(\zeta', \tau') \Big|_{\tau' = \tau - \zeta + \zeta'} . \quad (4.34)$$

Wir können in diesem Zusammenhang den Integraloperator  $\hat{K}$  definieren als

$$\boxed{(\hat{K}f)(\zeta, \tau) = \int_{\zeta - \tau}^{\zeta} d\zeta' (\hat{L}f)(\zeta', \tau') \Big|_{\tau' = \tau - \zeta + \zeta'} ,} \quad (4.35)$$

wobei  $f = f(\zeta, \tau)$  eine beliebige Funktion von  $\zeta$  und  $\tau$  sein soll. Wir können die Lösung (4.34) also in abstrakter Form schreiben als

$$B = \varphi + \hat{K}B \quad (4.36)$$

und können diese Gleichung nun algebraisch umformen zu

$$B = \frac{1}{1 - \hat{K}} \varphi \quad (4.37)$$

und dies in eine geometrische Reihe entwickeln,

$$B = \sum_{i=0}^{\infty} \hat{K}^i \varphi . \quad (4.38)$$

Damit haben wir die Amplitudenfunktion  $B(\zeta, \tau)$  als Reihenentwicklung nach der homogenen Lösung  $\varphi(\zeta - \tau)$  ausgedrückt,

$$\boxed{B(\zeta, \tau) = \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{K}^i \varphi)(\zeta, \tau) .} \quad (4.39)$$

Die algebraische Umstellung der rekursiv definierten Lösung (4.34) und die formale Entwicklung des Operators  $(1 - \hat{K})^{-1}$  in eine geometrische Reihe entspricht genau dem iterativen Einsetzen der Lösung (4.34) in sich selbst (im Integraloperator). Dies ist ein wohlbekanntes Lösungsverfahren und entspricht z.B. genau dem Verfahren, das in der

Quantenmechanik bei der Lösung des Streuproblems angewendet wird (Bornsche Reihe, vergleiche [40], Bd. 2, Abschnitt 8.2.3 f., ab Seite 112).

In der Praxis wird man selten über die erste Ordnung hinaus entwickeln, insbesondere da in diesem Fall der Integraloperator in höheren Potenzen sehr schwierig zu handhaben ist. Besonders deutlich werden wir das bei der Lösung der matrixwertigen Schrödinger-Gleichung in Kapitel 6 sehen. Konvergenzfragen im Bezug auf die Reihenentwicklung behandeln wir in der vorliegenden Arbeit nicht.

### 4.2.3 Variablentransformation in der WKB-Lösung

Letztendlich ist man an der Amplitudenfunktion  $A(z, t) = B(\zeta(z), \tau(t))$  interessiert. Wir müssen dazu den Integraloperator  $\hat{K}$  in Abhängigkeit von der Ortskoordinate  $z$  und der Zeit  $t$  schreiben. Bei der Verwendung der Charakteristiken-Phase ist dies kein Problem, da dann anstelle von  $\zeta$  ohnehin schon  $z$  verwendet wird und  $\tau(t) = \frac{\bar{k}}{m}t$  einfach eingesetzt werden kann.

Bei der WKB-Lösung muss man das Integral über  $\zeta'$  in ein Integral über  $z'$  umwandeln. Dazu verwenden wir die Definition von  $\zeta(z)$  aus Gl. (4.5) und erhalten

$$d\zeta = \frac{\bar{k}}{k(z)} dz . \quad (4.40)$$

Für die Integralgrenzen benötigen wir die Umkehrfunktion von  $\zeta(z)$ , die wir mit  $\mathcal{Z}(\zeta)$  kennzeichnen wollen und für die

$$\mathcal{Z}(\zeta(z)) = z \quad (4.41)$$

erfüllt sein muss. Für die Integraluntergrenze  $\zeta - \tau$  im Operator  $\hat{K}$  führen wir eine neue Funktion ein, um die Schreibweise so kompakt wie möglich zu halten. Es sei daher

$$u(z, t) := \mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t)) . \quad (4.42)$$

Der Integraloperator  $\hat{K}$  aus (4.35) lautet dann

$$\boxed{(\hat{K}f)(z, t) = \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} (\hat{L}f)(z', \tau') \Big|_{\tau' = \tau(t) - \zeta(z) + \zeta(z')} ,} \quad (4.43)$$

wobei es sich in der Praxis anbietet, die Variable  $\tau$  bei der Anwendung des Operator  $\hat{L}$  im Integranden zunächst beizubehalten und erst am Ende der Rechnung durch  $\tau(t) = \frac{\bar{k}}{m}t$  zu ersetzen.

Wir wollen nun noch einige Anmerkungen zu der Funktion  $u(z, t)$  machen, die uns im Folgenden noch häufig begegnen wird. Zunächst ist es i.A. nicht möglich, die Umkehrfunktion zu  $\zeta(z)$  analytisch anzugeben, da das Potential  $V(z)$  zum einen sehr kompliziert sein kann und zum anderen in der Praxis auch nur numerisch berechnet wird. Deshalb ist es sinnvoll, die Integration über  $z$  anstelle von  $\zeta$  durchzuführen, da der Integrand hauptsächlich direkt von  $z$  abhängt. Lediglich die Einhüllende  $\varphi(\zeta(z) - \tau(t))$  hängt von  $\zeta(z)$  ab. Die Berechnung der Funktion  $\zeta(z)$  ist aber wesentlich einfacher möglich als die Berechnung ihrer Umkehrfunktion.

Durch die Variablentransformation im Integral benötigen wir die Umkehrfunktion  $u(z, t)$  nur noch an einer einzigen Stelle in der Formel, nämlich in der Integraluntergrenze. Hier kann  $u(z, t)$  sehr gut physikalisch interpretiert werden, wie wir nun zeigen wollen.

In Abschnitt 3.3.3 haben wir bei der Diskussion des Fahrplanmodells die Zeit  $T_\alpha(Z)$  definiert, die das Atom im Zustand  $|\alpha(Z)\rangle$  benötigt, um im Potential  $V_\alpha(Z)$  vom Ort  $Z_0$  zum Ort  $Z$  zu gelangen, siehe Gl. (3.81). Hier wollen wir die Zeit berechnen, die der Schwerpunkt des Wellenpakets braucht, um im Potential  $V(z)$  vom Ort  $u(z, t)$  zum Ort  $z$  zu gelangen. Analog zu (3.81) ist diese gegeben durch

$$T(z, u(z, t)) = \frac{M}{\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} . \quad (4.44)$$

In diesem Integral können wir  $z \rightarrow \zeta(z)$  substituieren und erhalten

$$T(z, u(z, t)) = \frac{M}{\bar{k}} \int_{\zeta(u(z, t))}^{\zeta(z)} d\zeta' \frac{1}{k(\zeta')} = \frac{M}{\bar{k}} (\zeta(z) - \zeta(u(z, t))) . \quad (4.45)$$

Wegen

$$\zeta(u(z, t)) = \zeta(\mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t))) = \zeta(z) - \tau(t) \quad (4.46)$$

folgt also das einfache Ergebnis

$$T(z, u(z, t)) = \frac{M}{\bar{k}} \tau(t) = t . \quad (4.47)$$

Somit ist  $u(z, t)$  gerade der Ort, an dem ein Teilchen zur Zeit  $t = 0$  starten muss, um zur Zeit  $t$  am Ort  $z$  einzutreffen, nachdem es das Potential  $V(z)$  im entsprechenden Intervall durchquert hat. Hierin drückt sich wieder der semiklassische Charakter der Entwicklung der Wellenfunktion aus. Die Wellenfunktion am Ort  $z$  zur Zeit  $t$  erhält nur Korrekturbeiträge, die (im klassischen Sinne) die Zeit hatten, zum betrachteten Ort zu gelangen.

Zum Ende dieses Abschnitts wollen wir noch die Taylor-Entwicklung für  $u(z, t)$  für sehr kleine Zeiten angeben. Mit

$$\frac{d\zeta(z)}{dz} = \frac{\bar{k}}{k(z)} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{d\mathcal{Z}(\zeta)}{d\zeta} = \frac{k(\mathcal{Z}(\zeta))}{\bar{k}} . \quad (4.48)$$

folgt nämlich für die Taylorentwicklung der Umkehrfunktion  $\mathcal{Z}(\zeta - \tau)$  um  $\zeta$

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}(\zeta - \tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n \mathcal{Z}(\zeta)}{d\zeta^n} (-\tau)^n \\ &= \left[ z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \left( \frac{k(z)}{\bar{k}} \frac{d}{dz} \right)^{n-1} \frac{k(z)}{\bar{k}} \right) (-\tau)^n \right]_{z=\mathcal{Z}(\zeta)} \\ &= \left[ z - \frac{k(z)}{\bar{k}} \tau + \frac{1}{2} \left( \frac{k(z)}{\bar{k}} \frac{d}{dz} \frac{k(z)}{\bar{k}} \right) \tau^2 \mp \dots \right]_{z=\mathcal{Z}(\zeta)} .\end{aligned}\quad (4.49)$$

Wenden wir dieses Ergebnis auf die Funktion  $u(z, t)$  an, so folgt

$$u(z, t) = \mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t)) = z - \frac{k(z)}{m} t - \frac{(\partial_z V(z))}{2m} t^2 + \mathcal{O}(t^3) . \quad (4.50)$$

Für beliebig große Zeiten werden die Korrekturterme auch bei schwach veränderlichen Potentialen beliebig groß. Häufig ist man nur an der Wellenfunktion in einem relativ kurzen Zeitraum interessiert<sup>3</sup>. Dann kann man analog die Entwicklung

$$u(z, t + \Delta t) = u(z, t) - \frac{k(\mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t)))}{m} \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \quad (4.51)$$

betrachten.

#### 4.2.4 Anfangsbedingungen und Diskussion der Lösung

Die homogene Lösung in Gl. (4.34) wurde nicht ohne Grund mit dem Buchstaben  $\varphi$  bezeichnet. Sie entspricht nämlich der Einhüllenden  $\varphi(\zeta - \tau)$  der WKB-Lösung, bzw. im Falle der Verwendung der Charakteristiken-Phase der Einhüllenden  $\tilde{\varphi}(z - \frac{\bar{k}}{m} t)$ . Die Übereinstimmung ist exakt im Limes  $t \rightarrow 0$  und damit für  $\tau \rightarrow 0$ , also am Anfang der Zeitentwicklung, wenn die Integralgrenzen im Integraloperator  $\hat{K}$  identisch sind. Es folgt nach Gl. (4.34) bei Verwendung des WKB-Phasenfaktors

$$B(\zeta(z), \tau = 0) = \varphi(\zeta(z)) . \quad (4.52)$$

Die vollständige Wellenfunktion inklusive Phasenfaktor lautet dann gemäß (4.6)

$$\Psi(z, t = 0) = e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, 0)} \varphi(\zeta(z)) . \quad (4.53)$$

Geht man vom Charakteristiken-Phasenwinkel aus, so ist

$$\Psi(z, t = 0) = e^{i\phi_C(z, 0)} \tilde{\varphi}(z - z_0) . \quad (4.54)$$

---

<sup>3</sup> Z.B. der Zeitraum, an dem das Wellenpaket an einem Detektor am Ort  $Z_D$  eintrifft. Siehe dazu auch Abschnitt 6.3.3.



Mit diesem Resultat rechtfertigen wir die im Folgenden gelegentlich verwendete Bezeichnung von  $\varphi$  bzw.  $\tilde{\varphi}$  als Anfangswellenpaket (auch wenn zum gesamten Anfangswellenpaket strenggenommen noch der jeweilige Phasenfaktor gehört).

Zum Abschluss dieses Abschnitts wollen wir noch eine wichtige Bemerkung machen, auf die wir im Verlaufe dieses Kapitels noch zurückgreifen werden. Die hier betrachteten Operatoren  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  und  $\hat{L}_C$  aus Gl. (4.20) und (4.23) enthalten beide einen Faktor proportional zu  $\bar{k}^{-1}$ . Auf der experimentell durch die IABSE-Apparatur vorgegebenen Längenskala, die auch den Integrationsbereich des Integraloperators vorgibt und im Bereich von einigen Metern liegt<sup>4</sup>, stellt die inverse mittlere Wellenzahl  $\bar{k}^{-1}$ , die nach den Betrachtungen der Beispiele in Abschnitt 3.3 in der Größenordnung  $\mathcal{O}(10^{-10} \text{ m})$  liegt, eine extrem kleine Größe dar. Wir können die Entwicklung nach dem Integraloperator (der dimensionslos ist), also als Entwicklung nach Potenzen der inversen Wellenzahl auffassen.

Wir können nun die oben dargestellte Methode für die Berechnung der Amplitudenfunktion bei vorgegebenem Phasenwinkel einmal mit dem Charakteristiken-Phasenwinkel und einmal mit dem WKB-Phasenwinkel durchführen. Die auf diese Weise berechneten Wellenfunktion (also das Produkt von Phasenfaktor und Amplitudenfunktion) müssen dann in jeder Ordnung von  $\bar{k}^{-1}$  übereinstimmen.

Desweiteren kann man bei fester Ordnung im Integraloperator  $\hat{K}$  in beiden Fällen untersuchen, bis zu welcher Ordnung in  $\bar{k}^{-1}$  Terme in der jeweiligen Näherungslösung enthalten sind. Da jeder Integraloperator einen Faktor  $1/\bar{k}$  enthält, enthält die  $n$ -te Ordnung der Entwicklung in  $\hat{K}$  sicher alle Beiträge bis zur  $n$ -ten Ordnung in  $1/\bar{k}$ . Wie wir in Abschnitt 4.3.3 sehen werden, gibt ein Vergleich der Ordnungen in  $\hat{K}$  Aufschluss über die Qualität des Ansatzes für den Phasenwinkel.

Wir werden also im Folgenden stets unterscheiden zwischen der Ordnung der Entwicklung im Integraloperator  $\hat{K}$  und der Ordnung der Entwicklung in der inversen mittleren Wellenzahl  $\bar{k}^{-1}$ .

## 4.3 Anwendung des Formalismus

### 4.3.1 Verwendung des WKB-Phasenwinkels

Bei Verwendung des WKB-Phasenwinkels müssen wir im Integraloperator  $\hat{K}$  aus (4.43) den Operator  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  aus Gl. (4.20) auf das Anfangswellenpaket  $\varphi(\zeta - \tau)$  anwenden. Wir schreiben

$$\hat{L}_{\text{WKB}} = \mathcal{A}(z) + \mathcal{B}(z)\partial_\zeta + \mathcal{C}(z)\partial_\zeta^2, \quad (4.55)$$

---

<sup>4</sup>M. DeKieviet, private Kommunikation.

wobei gemäß (4.20)

$$\mathcal{A}(z) = \frac{1}{2\bar{k}} \left( \frac{m}{k(z)} \partial_z V(z) \right) = -\frac{1}{2\bar{k}} \partial_z k(z) , \quad (4.56a)$$

$$\mathcal{B}(z) = \frac{i}{2\bar{k}} \frac{m\bar{k}}{(k(z))^3} (\partial_z V(z)) = \frac{i}{2\bar{k}} \partial_z \frac{\bar{k}}{k(z)} , \quad (4.56b)$$

$$\mathcal{C}(z) = \frac{i}{2\bar{k}} \frac{\bar{k}^2}{(k(z))^2} \quad (4.56c)$$

gilt. Da diese Funktionen nicht zeitabhängig sind, ist die Berechnung der Ableitungen der Anfangswellenpakete und die anschließende Substitution  $\tau' \rightarrow \tau - \zeta + \zeta'$  leicht durchzuführen. Es gilt

$$[\partial_{\zeta'}^n \varphi(\zeta' - \tau')]_{\tau' \rightarrow \tau - \zeta + \zeta'} = \varphi^{(n)}(\zeta - \tau) , \quad (n \in \mathbb{N}_0) , \quad (4.57)$$

also können wir im Operator  $\hat{K}$  die Ableitungen der Wellenpakete vor das Integral ziehen erhalten dann

$$\begin{aligned} (\hat{K}_{\text{WKB}} \varphi)(z, t) &= \mathcal{U}(z, u(z, t)) \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &\quad + \mathcal{V}(z, u(z, t)) \varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &\quad + \mathcal{W}(z, u(z, t)) \varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) \end{aligned} \quad (4.58)$$

mit

$$\mathcal{U}(z, u(z, t)) = -\frac{1}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \partial_{z'} k(z') = \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} , \quad (4.59a)$$

$$\mathcal{V}(z, u(z, t)) = \frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \partial_{z'} \frac{\bar{k}}{k(z')} = \frac{i}{4\bar{k}} \left[ \frac{\bar{k}^2}{k^2(z')} \right]_{u(z, t)}^z , \quad (4.59b)$$

$$\mathcal{W}(z, u(z, t)) = \frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \left( \frac{\bar{k}}{k(z')} \right)^3 . \quad (4.59c)$$

In erster Ordnung  $\hat{K}$  erhalten wir also bei Verwendung des WKB-Phasenwinkels die Wel-

---

lenfunktion

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) &= e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, t)} A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) \\
&= e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, t)} \left\{ \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) + (\hat{K}_{\text{WKB}}\varphi)(z, t) \right\} \\
&= e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, t)} \left\{ \left[ 1 + \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} \right] \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \right. \\
&\quad + \frac{i}{4\bar{k}} \left[ \frac{\bar{k}^2}{k^2(z')} \right]_{u(z, t)}^z \varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \\
&\quad \left. + \left( \frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \left( \frac{\bar{k}}{k(z')} \right)^3 \right) \varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.60}$$

### 4.3.2 Verwendung des Charakteristiken-Phasenwinkels

#### Erste Ordnung

Im Charakteristiken-Fall haben wir die Koordinaten  $z, \tau$  anstelle von  $\zeta, \tau$  zu verwenden, sowie das Anfangswellenpaket  $\tilde{\varphi}(z - \tau)$ . Der in (4.23) definierte Operator  $\hat{L}_C$  führt zu

$$(\hat{L}_C \tilde{\varphi})(z, \tau) = \frac{i}{2\bar{k}} \tilde{\varphi}''(z - \tau) - \frac{im}{\bar{k}} V(z) \tilde{\varphi}(z - \tau) \tag{4.61}$$

und somit zu

$$(\hat{K}_C \tilde{\varphi})(z, t) = \tilde{\varphi}''(z - \tau) \frac{i}{2\bar{k}} \tau - \tilde{\varphi}(z - \tau(t)) \frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau(t)}^z dz' V(z'). \tag{4.62}$$

Also ist in erster Ordnung

$$\begin{aligned}
\Psi_C^{(1)}(z, t) &= e^{i\phi_C(z, t)} A_C^{(1)}(z, t) \\
&= e^{i\phi_C(z, t)} \left\{ \tilde{\varphi}(z - \tau(t)) + (\hat{K}_C \tilde{\varphi})(z, t) \right\} \\
&= e^{i\phi_C(z, t)} \left\{ \left[ 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau(t)}^z dz' V(z') \right] \tilde{\varphi}(z - \tau(t)) \right. \\
&\quad \left. + \frac{i}{2\bar{k}} \tau(t) \tilde{\varphi}''(z - \tau(t)) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.63}$$


---

## Zweite Ordnung

Für die Berechnung der zweiten Ordnung müssen wir die Wirkung des Integraloperators  $\hat{K}_C$  auf  $(\hat{K}_C \tilde{\varphi})(z, t)$  kennen. Zunächst berechnen wir die Wirkung des Differentialoperators  $\hat{L}_C$  und erhalten

$$\begin{aligned}
 (\hat{L}_C \hat{K}_C \tilde{\varphi})(z, \tau) = & \tilde{\varphi}(z - \tau) \left[ -\frac{m^2}{\bar{k}^2} V(z) \int_{z-\tau}^z dz' V(z') + \frac{m}{2\bar{k}^2} [V'(z) - V'(z - \tau)] \right] \\
 & + \tilde{\varphi}'(z - \tau) \frac{m}{\bar{k}^2} [V(z) - V(z - \tau)] \\
 & + \tilde{\varphi}''(z - \tau) \frac{m}{2\bar{k}^2} \left[ \tau V(z) + \int_{z-\tau}^z dz' V(z') \right] \\
 & - \tilde{\varphi}^{(4)}(z - \tau) \frac{1}{4\bar{k}^2} \tau
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

und hieraus nach einiger Rechnung schließlich

$$\begin{aligned}
 B_C^{(2)}(z, \tau) = & \tilde{\varphi}(z - \tau) \left[ 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') - \frac{m^2}{\bar{k}^2} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') \int_{z-\tau}^{z'} dz'' V(z'') \right. \\
 & \left. - \frac{m}{2\bar{k}^2} (\tau V'(z - \tau) - V(z) + V(z - \tau)) \right] \\
 & + \tilde{\varphi}'(z - \tau) \frac{m}{\bar{k}^2} \left[ \int_{z-\tau}^z dz' V(z') - \tau V(z - \tau) \right] \\
 & + \tilde{\varphi}''(z - \tau) \left[ \frac{i}{2\bar{k}} \tau + \frac{m}{2\bar{k}^2} \tau \int_{z-\tau}^z dz' V(z') \right] \\
 & - \tilde{\varphi}^{(4)}(z - \tau) \frac{1}{8\bar{k}^2} \tau^2 .
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

Alle Beiträge proportional zu  $\bar{k}^{-2}$  sind dabei in der zweiten Ordnung entstanden. Die Gesamtwellenfunktion ergibt sich hieraus einfach durch

$$\Psi_C^{(2)}(z, t) = e^{i\phi_C(z, t)} A_C^{(2)}(z, t) = e^{i\phi_C(z, t)} B_C^{(2)}(z, \tau(t)) . \tag{4.66}$$

### 4.3.3 Vergleich der beiden Entwicklungen

Wie am Ende von Abschnitt 4.2.4 bereits angesprochen wurde, gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten des Vergleichs. Entweder man vergleicht die Beiträge in der Entwicklung zu

vorgegebener Ordnung des Operators  $\hat{K}$  oder man vergleicht die Beiträge zu einer festen Ordnung in  $1/\bar{k}$ . Beide Varianten bringen unterschiedliche Erkenntnisse.

Der Koeffizientenvergleich der Potenzen von  $1/\bar{k}$  ermöglicht die Überprüfung der berechneten Entwicklungen für den WKB-Fall und den Charakteristiken-Fall, denn beide müssen in jeder Ordnung von  $1/\bar{k}$  übereinstimmen. Desweiteren liefert die Entwicklung nach Potenzen von  $1/\bar{k}$  für eine feste Ordnung im Integraloperator  $\hat{K}$  einen Hinweis auf die Qualität des Ansatzes. Wurde der Ansatz gut gewählt, sollten bereits bei niedrigen Ordnungen in  $\hat{K}$  Beiträge von höheren Ordnungen in  $1/\bar{k}$  zu finden sein. Ebenso sollte der bessere Ansatz bei fester Ordnung in  $\hat{K}$  zu betragsmäßig kleineren Korrekturen führen.

### Vergleich bis zur Ordnung $1/\bar{k}$

Wir wenden uns zunächst den Entwicklungen in  $1/\bar{k}$  zu. Wir betrachten die jeweils erste Ordnung in  $\hat{K}$ , d.h. die Gln. (4.60) und (4.63). In  $A_C^{(1)}(z, t)$  aus (4.63), zur Erinnerung

$$A_C^{(1)}(z, t) = \tilde{\varphi}(z - \tau(t)) \left[ 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau(t)}^z dz' V(z') \right] + \tilde{\varphi}''(z - \tau(t)) \frac{i}{2\bar{k}} \tau(t), \quad (4.67)$$

gibt es zwei Korrekturbeiträge, die beide erster Ordnung in  $\bar{k}^{-1}$  sind. Diese vergleichen wir nun mit den Beiträgen erster Ordnung in  $A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t)$  aus (4.60), zur Erinnerung

$$\begin{aligned} A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) = & \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \left[ 1 + \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} \right] \\ & + \varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \frac{i}{4\bar{k}} \left( \frac{\bar{k}^2}{k^2(z)} - \frac{\bar{k}^2}{k^2(u(z, t))} \right) \\ & + \varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) \frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}^3}{k^3(z')}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Hierzu müssen wir  $A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t)$  weiter nach Potenzen von  $1/\bar{k}$  entwickeln, und zwar nur bis zur ersten Ordnung, um den gewünschten Vergleich ziehen zu können. Der Übersichtlichkeit halber schreiben wir die beiden Lösungen gemeinsame Variable  $\tau(t)$  im Folgenden kurz  $\tau$ . Die genaue Zeitabhängigkeit von  $\tau(t)$  spielt für die folgenden Betrachtungen keine Rolle.

Wir beginnen mit der Entwicklung der Argumente und der Wellenfunktion  $\varphi(\zeta(z) - \tau)$ . Nach Definition von  $\zeta(z)$  in (4.5) gilt

$$\zeta(z) = \int_{z_0}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} = \int_{z_0}^z dz' \frac{\bar{k}}{\sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')}} = \int_{z_0}^z dz' \frac{1}{\sqrt{1 - 2mV(z')/\bar{k}^2}}. \quad (4.69)$$

Hieran erkennt man, dass nach Entwicklung der Wurzel

$$\zeta(z) = z - z_0 + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) \quad (4.70)$$

folgt, also keine linearen Beiträge in  $1/\bar{k}$  auftreten. In erster Ordnung in  $1/\bar{k}$  kann das WKB-Anfangswellenpaket also geschrieben werden als

$$\varphi(\zeta(z) - \tau) \approx \varphi((z - z_0) - \tau) . \quad (4.71)$$

Nun betrachten wir die Koeffizienten der verschiedenen Ableitungen der Wellenfunktion in (4.68). Wir beginnen bei dem Logarithmus-Term, der eine Korrektur zweiter Ordnung in  $\bar{k}^{-1}$  ist. Dies sieht man, indem man das Argument des Logarithmus nach kleinen Potentialen entwickelt. Es gilt mit  $u(z, t)$  aus (4.42)

$$\frac{k(z)}{k(u(z, t))} = \sqrt{\frac{1 - 2mV(z)/\bar{k}^2}{1 - 2mV(u(z, t))/\bar{k}^2}} = \sqrt{1 - \frac{2m(V(z) - V(u(z, t)))}{\bar{k}^2}} + \mathcal{O}(\bar{k}^{-4}) .$$

Hiermit folgt

$$\ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} = -\frac{1}{2} \ln \left( \frac{k(z)}{k(u(z, t))} \right) = \frac{m(V(z) - V(u(z, t)))}{2\bar{k}^2} + \mathcal{O}(\bar{k}^{-4}) . \quad (4.72)$$

Der Koeffizient der ersten Ableitung von  $\varphi$  wird in der Entwicklung nach Potenzen von  $1/\bar{k}$  zu

$$\frac{i}{4\bar{k}} \left( \frac{\bar{k}^2}{k^2(z)} - \frac{\bar{k}^2}{k^2(u(z, t))} \right) = \frac{i}{4\bar{k}} \left( -\frac{m(V(z) - V(u(z, t)))}{\bar{k}^2} + \mathcal{O}(\bar{k}^{-4}) \right) = \mathcal{O}(\bar{k}^{-3}) \quad (4.73)$$

und der Koeffizient von  $\varphi''$  lautet unter Verwendung von (4.50), d.h.  $u(z, t) = z - \tau + \mathcal{O}(\bar{k}^{-1})$  schließlich

$$\frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}^3}{k^3(z')} = \frac{i}{2\bar{k}} \tau + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) . \quad (4.74)$$

Wie man sieht, dominiert dieser Term die beiden anderen, da er der einzige Korrekturterm mit der Ordnung  $\mathcal{O}(1/\bar{k})$  ist. Insgesamt kann  $A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t)$  in erster Ordnung in  $1/\bar{k}$  damit geschrieben werden als

$$A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) = \varphi((z - z_0) - \tau) + \varphi''((z - z_0) - \tau) \frac{i}{2\bar{k}} \tau + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) . \quad (4.75)$$

Um diese Gleichung mit der ersten Ordnung in der Entwicklung der Charakteristiken-Lösung vergleichen zu können, müssen wir die Phasenfaktoren noch berücksichtigen. Wir

entwickeln den WKB-Phasenwinkel (4.10) nach  $1/\bar{k}$ :

$$\begin{aligned}
 \phi_{\text{WKB}}(z, t) &= -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \\
 &= -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \bar{k}(z - z_0) - \frac{m}{\bar{k}} \int_{z_0}^z dz' V(z') + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) \\
 &= \phi_{\text{C}}(z - z_0, t) - \frac{m}{\bar{k}} \int_{z_0}^z dz' V(z') + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2})
 \end{aligned} \tag{4.76}$$

mit dem Charakteristiken-Phasenwinkel  $\phi_{\text{C}}(z, t)$  aus (4.21). Entwickeln wir nun den gesamten WKB-Phasenfaktor, so folgt

$$e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, t)} = e^{i\phi_{\text{C}}(z - z_0, t)} \left( 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z_0}^z dz' V(z') + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) \right). \tag{4.77}$$

Nun können wir die Wellenfunktionen in erster Ordnung  $1/\bar{k}$  insgesamt vergleichen. Wir haben

$$\begin{aligned}
 \Psi_{\text{C}}^{(1)}(z, t) &= e^{i\phi_{\text{C}}(z, t)} A_{\text{C}}^{(1)}(z, t) \\
 &= \exp \left\{ -i\frac{\bar{k}^2}{2m}t + i\bar{k}z \right\} \left( \tilde{\varphi}(z - \tau(t)) \left[ 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z - \tau(t)}^z dz' V(z') \right] \right. \\
 &\quad \left. + \tilde{\varphi}''(z - \tau(t)) \frac{i}{2\bar{k}} \tau(t) \right)
 \end{aligned} \tag{4.78}$$

und analog

$$\begin{aligned}
 \Psi_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) &= e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, t)} A_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) \\
 &= \exp \left\{ -i\frac{\bar{k}^2}{2m}t + i\bar{k}(z - z_0) \right\} \\
 &\quad \times \left( \varphi((z - z_0) - \tau(t)) \left[ 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z_0}^z dz' V(z') \right] \right. \\
 &\quad \left. + \varphi''((z - z_0) - \tau(t)) \frac{i}{2\bar{k}} \tau(t) + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) \right).
 \end{aligned} \tag{4.79}$$

Der einzige sichtbare Unterschied zwischen den Gln. (4.78) und (4.79) sind die verschiedenen Einhüllenden  $\varphi$  und  $\tilde{\varphi}$ . Bei gleichen Anfangsbedingungen gilt hier der Zusammenhang

$$\Psi(z, t = 0) = e^{i\phi_{\text{C}}(z, t=0)} \tilde{\varphi}(z) \stackrel{!}{=} e^{i\phi_{\text{WKB}}(z, t=0)} \varphi(\zeta(z)) \tag{4.80}$$

festgelegt. Nach Einsetzen der Phasenwinkel aus (4.21) und (4.10) folgt

$$\tilde{\varphi}(z) = \exp \left\{ -i\bar{k}z + i \int_{z_0}^z dz' k(z') \right\} \varphi(\zeta(z)) \quad (4.81)$$

und für Zeiten  $t > 0$ , d.h.  $z \rightarrow z - \tau$ ,

$$\tilde{\varphi}(z - \tau) = \exp \left\{ -i\bar{k}(z - \tau) + i \int_{z_0}^{z-\tau} dz' k(z') \right\} \varphi(\zeta(z - \tau)) . \quad (4.82)$$

Entwickeln wir in dieser Gleichung mit den zuvor verwendeten Methoden wieder alles bis zur Ordnung  $1/\bar{k}$ , erhalten wir

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(z - \tau) &= \exp \left\{ -i\bar{k}z_0 - i\frac{m}{\bar{k}} \int_{z_0}^{z-\tau} dz' V(z') \right\} \varphi((z - z_0) - \tau) + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) \\ &= e^{-i\bar{k}z_0} \left( 1 - i\frac{m}{\bar{k}} \int_{z_0}^{z-\tau} dz' V(z') \right) \varphi((z - z_0) - \tau) + \mathcal{O}(\bar{k}^{-2}) . \end{aligned} \quad (4.83)$$

Nach zweifachem Ableiten nach  $(z - \tau)$  erhalten wir

$$\tilde{\varphi}''(z - \tau) = e^{-i\bar{k}z_0} \varphi''((z - z_0) - \tau) + \mathcal{O}(\bar{k}^{-1}) . \quad (4.84)$$

Bei der zweiten Ableitung brauchen wir nur Terme nullter Ordnung in  $1/\bar{k}$  zu berücksichtigen, da in (4.78) bereits ein Koeffizient erster Ordnung in  $1/\bar{k}$  vorhanden ist. Setzt man die Ausdrücke der letzten beiden Gleichungen nun explizit in (4.78) ein, so erhält man sofort das zu (4.79) identische Ergebnis, d.h. es gilt tatsächlich

$$\Psi_C^{(1)}(z, t) = \Psi_{\text{WKB}}^{(1)}(z, t) \quad (\text{in } \mathcal{O}(\bar{k}^{-1})) . \quad (4.85)$$

Analog würde man einen Vergleich der Entwicklung bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(\bar{k}^{-2})$  angehen. Hierzu müsste man zunächst die zweite Ordnung in  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  für den WKB-Fall,  $A_{\text{WKB}}^{(2)}(z, t)$ , berechnen, da nur dann sichergestellt ist, dass alle Beiträge der zweiten Ordnung in  $1/\bar{k}$  berücksichtigt werden.

### Vergleich der Entwicklungen in $\hat{K}$

Nachdem wir uns nun hinreichend davon überzeugt haben, dass sowohl die Charakteristiken- wie auch die WKB-Entwicklung zu identischen Wellenfunktionen führen, wollen wir nun weiter die Qualität dieser beiden Entwicklungen vergleichen.



Zunächst betrachten wir erneut den Zusammenhang zwischen der Entwicklung nach Potenzen des Integraloperators  $\hat{K}$  und der Entwicklung nach Potenzen von  $1/\bar{k}$  und stellen dabei fest, dass hier der WKB-Fall klar im Vorteil ist. Bereits in erster Ordnung in  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  erhält man dort Beiträge beliebig hoher Ordnung in  $1/\bar{k}$ , aufsummiert in den einzelnen Korrekturbeiträgen, siehe Gln. (4.72) bis (4.74). In der Charakteristiken-Entwicklung hat man in erster Ordnung in  $\hat{K}_C$  tatsächlich nur Korrekturen erster Ordnung in  $1/\bar{k}$ .

Nun werfen wir einen Blick auf die zweite Ordnung der Entwicklung in  $\hat{K}_C$  der Charakteristiken-Lösung. In Gl. (4.65) erkennt man in der ersten Zeile von  $B_C^{(2)}(z, \tau)$  die Entwicklung eines Phasenfaktors

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ -\frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') \right\} \\ & \approx 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') - \frac{1}{2!} \frac{m^2}{\bar{k}^2} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') \int_{z-\tau}^z dz'' V(z'') \\ & = 1 - \frac{im}{\bar{k}} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') - \frac{m^2}{\bar{k}^2} \int_{z-\tau}^z dz' V(z') \int_{z-\tau}^{z'} dz'' V(z'') . \end{aligned} \quad (4.86)$$

Dieser Phasenfaktor entspricht dem bereits in Gl. (4.2) enthaltenen Phasenfaktor der Charakteristiken-Lösung. Während diese aber nur eine Näherungslösung war, liefert die Entwicklung auf einfache Weise Korrekturterme höherer Ordnung. Der Phasenfaktor (4.86) stellt aber auch, zusammen mit dem Anteil  $e^{ikz}$  des Charakteristiken-Phasenfaktors aus (4.1), die Entwicklung eines WKB-ähnlichen Phasenfaktors

$$\exp \left\{ +i\bar{k}(z - \tau) + i \int_{z-\tau}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \quad (4.87)$$

für sehr kleine Potentiale und kleine  $\tau$  dar. Dies ist eine mathematische Bestätigung für die bereits aus physikalischen Argumenten gewonnene Einsicht, dass der WKB-Phasenfaktor geeigneter für die Beschreibung einer im semiklassischen Sinne realistischen Wellenfunktion ist.

Wie man in Gl. (4.86) weiter sehen kann, sind im dort angegebenen Phasenfaktor Terme aufsummiert, die sich typischerweise wie Potenzen von  $m\tau V/\bar{k}$  verhalten. Diese Terme werden trotz kleiner Potentiale bei großen Zeiten beliebig groß. Nach der eben geführten Diskussion sind diese Terme im WKB-Phasenfaktor bereits aufsummiert. Wählt man die Charakteristiken-Phase, bekommt man dagegen nur die (beliebig großen) Einzelterme in jeder Ordnung der Entwicklung. Dies ist ein weiteres Argument für den WKB-Phasenfaktor als Ausgangspunkt für den Entwicklungs-Formalismus.

Schließlich gibt es im Zusammenhang mit dem grundlegenden Phasenfaktor (4.87), der in der Charakteristiken-Lösung zweiter Ordnung in entwickelter Form offenbar auftritt, noch eine weitere, bemerkenswerte Tatsache. Korrigieren wir den ursprünglichen Charakteristiken-Phasenfaktor mit dem Phasenwinkel  $\phi_C(z, t)$  aus Gl. (4.21) nämlich gerade um (4.87), d.h. setzen wir

$$\Psi_C(z, t) \approx \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \bar{k}(z - \tau(t)) + i \int_{z-\tau(t)}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \tilde{\varphi}(z - \tau(t)) \quad (4.88)$$

und verwenden weiter den Zusammenhang (4.82) zwischen  $\tilde{\varphi}$  und  $\varphi$ , so erhalten wir gerade

$$\Psi_C(z, t) \approx \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}^2}{2m} t + i \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} \right\} \varphi(\zeta(z - \tau(t))) . \quad (4.89)$$

Dies entspricht beinahe der WKB-Näherungslösung (4.4), dort ist lediglich anstelle von  $\zeta(z - \tau(t))$  der Ausdruck  $\zeta(z) - \tau(t)$  im Argument von  $\varphi$  zu finden. Man kann sich davon überzeugen, dass

$$\zeta(z - \tau) = \zeta(z) - \tau(t) + \mathcal{O}\left(\frac{\tau m V}{\bar{k}}\right) \quad (4.90)$$

gilt. Im Argument der WKB-Näherungslösung, das ja die Bewegung eines Teilchens im klassischen Sinne richtig beschreibt, sind also wieder alle Potenzen der bereits zuvor diskutierten Größe  $\tau m V / \bar{k}$  aufsummiert, nicht aber im Argument der Charakteristiken-Lösung, die mit dem WKB-Anfangswellenpaket über (4.82) zusammenhängt.

Kommen wir zum Abschluss dieses Abschnitts noch zu einem letzten Argument, dass für die Verwendung des WKB-Phasenwinkels bei der Berechnung der exakten Lösung spricht.

Im Koeffizienten zu  $\tilde{\varphi}(z - \tau)$  der Charakteristiken-Entwicklung zweiter Ordnung in  $\hat{K}_C$  findet sich u.a. ein Term

$$\frac{m(V(z) - V(z - \tau))}{2\bar{k}^2} .$$

Dieser Beitrag entspricht dem  $1/\bar{k}^2$ -Beitrag des entwickelten Logarithmus-Terms aus der WKB-Entwicklung, Gl. (4.72), allerdings in der weiteren Näherung  $u(z, t) = \mathcal{Z}(\zeta(z)) - \tau(t) \approx z - \tau(t)$  (siehe Gl. (4.50)). Wir haben also in der Charakteristiken-Entwicklung in zweiter Ordnung eine Korrektur erhalten, die eine Näherung einer Korrektur ist, die in der WKB-Entwicklung bereits in aufsummierter Form in erster Ordnung enthalten ist.

Insgesamt zeigen die Ergebnisse dieses Kapitels, dass die Verwendung des WKB-Phasenwinkels zu physikalisch sinnvoller Resultaten führt als die Verwendung des Charakteristiken-Phasenwinkels. Bereits die nullte Ordnung der Entwicklung (4.39) gibt eine gute Näherung mit korrekter Schwerpunktsbewegung des Wellenpakets und potentiellabhängigem Phasenfaktor.

### 4.3.4 Abschätzung der Gültigkeit der WKB-Lösung

Bevor wir noch einmal die bisherigen Ergebnisse zusammenfassen, wollen wir noch untersuchen, in welchem experimentellen Rahmen die WKB-Näherungslösung eine gute Approximation darstellt.

Betrachten wir zunächst die Entwicklung der WKB-Lösung nach Gl. (4.68). Damit das ursprüngliche WKB-Wellenpaket eine gute Approximation darstellt, muss der dominierende Anteil im Korrekturterm, siehe Gl. (4.75), verschwindend gering sein, d.h.

$$\left| \frac{\tau}{2\bar{k}} \frac{\varphi''(\zeta - \tau)}{\varphi(\zeta - \tau)} \right| \ll 1 . \quad (4.91)$$

Nehmen wir eine Gauß-Funktion

$$\varphi(\zeta - \tau) \propto e^{-(\zeta - \tau)^2 / 2\sigma^2} \quad (4.92)$$

für die Einhüllende des Wellenpakets an, so folgt

$$\frac{\varphi''(\zeta - \tau)}{\varphi(\zeta - \tau)} = \frac{(\zeta - \tau)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} \quad (4.93)$$

und mit (4.91) also

$$\left| \frac{\tau}{2\bar{k}} \frac{\varphi''(\zeta - \tau)}{\varphi(\zeta - \tau)} \right| = \frac{\tau}{2\bar{k}} \left| \frac{(\zeta - \tau)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} \right| = \frac{\tau}{2\bar{k}} \left| \frac{\sigma^2 - (\zeta - \tau)^2}{\sigma^4} \right| \ll 1 . \quad (4.94)$$

Von Interesse sind dabei nur Werte  $|\zeta - \tau|^2 \leq \sigma^2$  des Arguments des Gauß-Pakets. Maximal wird der Betrag von  $\varphi(\zeta - \tau)$  in diesem Bereich für  $\zeta = \tau$ , also am Maximum des Wellenpakets. Damit erhalten wir die Forderung

$$\epsilon := \frac{\tau}{2\bar{k}} \frac{1}{\sigma^2} \ll 1 \quad (4.95)$$

und somit

$$\boxed{\sigma \gg \sqrt{\frac{\tau}{2\bar{k}}} =: \sigma_{\min}} . \quad (4.96)$$

Der maximale Wert von  $\tau$  entspricht der Länge der Apparatur, die im Bereich von unter zehn Metern liegt<sup>5</sup>. Wählen wir z.B. eine Apparatur-Länge von

$$\tau_A = 5 \text{ m} , \quad (4.97)$$

$\bar{v}$ [m/s]	$T$ [K]	$\bar{k}$ [ $10^{10} \text{ m}^{-1}$ ]	$\bar{\lambda}$ [ $10^{-10} \text{ m}$ ]	$\sigma_{\min}$ [m]	$\sigma_{\min}/\bar{\lambda}$
1800	77	2,9	2,197	$9,3 \cdot 10^{-6}$	$\approx 42000$
3500	300	5,6	1,130	$1,5 \cdot 10^{-5}$	$\approx 132000$

**Tabelle 4.1:** Typische experimentelle Strahlgeschwindigkeiten und Temperaturen (M. DeKieviet, private Kommunikation) und die daraus für Wasserstoff folgenden mittleren Wellenzahlen, Wellenlängen und die unteren Schranken für die Breite des Wellenpakets gemäß (4.96).

so folgen für typische Strahlgeschwindigkeiten die in Tabelle 4.1 gezeigten unteren Schranken für die Breite der Wellenpakete. Ein Blick auf die Werte in der letzten Spalte der Tabelle macht nachdenklich. Haben wir in Gl. (2.73) noch behauptet, das WKB-Wellenpaket wäre unter der Voraussetzung

$$\sigma \gg \frac{1}{2\bar{k}} = \frac{\bar{\lambda}}{4\pi} \quad (4.98)$$

eine gute Näherung, so bekommen wir hier als untere Schranke einen Ausdruck, der proportional zur Wurzel dieses Wertes ist, was im realistischen Fall (wo  $\tau = \mathcal{O}(1 \text{ m})$  ist) etwa dem  $10^4$  bis  $10^5$ -fachen entspricht. Das Problem mit der damaligen Abschätzung ist, dass sie unter der impliziten Annahme entstand, die WKB-Wellen, die wir dort überlagert haben, wären exakte Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Dies ist aber mitnichten der Fall, denn wir haben in Abschnitt 2.3 ja gerade die zweiten Ortsableitungen des Phasenwinkels und der Amplitudenfunktion vernachlässigt und außerdem die Amplitude der ebenen WKB-Wellen zu Eins gesetzt.

Nachdem wir nun in der Lage sind, die exakte Wellenfunktion mit dem WKB-Wellenpaket als nullte Ordnung zu entwickeln, zeigt uns die Korrektur erster Ordnung, dass der Term proportional zur zweiten Ableitung nach  $\zeta$  den größten Beitrag liefert. Dieser Term ist aber gerade aus der Transformation der zweiten Ortsableitung  $\partial_z^2$  der Amplitudenfunktion in die zweite Ableitung nach  $\zeta = \zeta(z)$  entstanden (siehe Abschnitt 4.2.1), also genau aus dem Beitrag, den wir in Abschnitt 2.3 in der Schrödinger-Gleichung von vornherein vernachlässigt haben.

Die einzig verlässliche Bedingung für die Gültigkeit der WKB-Näherungslösung ist also die aus Gl. (4.96)

Betrachten wir nun ein freies Gaußpaket mit Dispersion. Eine anschauliche Rechnung hierzu findet sich in [40], Bd. 1, Abschnitt 1.11, S. 51 ff.. Dort wird in Gl. (1.170) ein Ausdruck für die Breite  $\Delta x(t)$  des Wellenpakets zur Zeit  $t$  angegeben, was in unserer Notation  $\sigma(t)/\sqrt{2}$  entspricht. Wir erhalten mit Gl. (1.170) aus [40] ( $\hbar = 1$ ,  $a^2 = 2\sigma^2$ )

$$\sigma(t) = \sigma \sqrt{1 + \frac{t^2}{m^2 \sigma^4}} = \sigma \left( 1 + \frac{t^2}{2m^2 \sigma^4} + \mathcal{O}\left(\frac{t^4}{m^4 \sigma^8}\right) \right). \quad (4.99)$$

---

<sup>5</sup>M. DeKieviet, private Diskussion.

Die Breite des Wellenpakets ändert sich also genau dann nicht signifikant mit der Zeit, wenn

$$\left| \frac{t^2}{2m^2\sigma^4} \right| \ll 1 \quad (4.100)$$

bzw.

$$\sigma \gg \sqrt{\frac{t}{\sqrt{2m}}} = 2^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\bar{k}t}{2\bar{k}m}} = 2^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\tau}{2\bar{k}}} \stackrel{(4.96)}{=} 2^{\frac{1}{4}} \sigma_{\min} \approx 1,18 \sigma_{\min} . \quad (4.101)$$

Der Fehler, den wir bei Verwendung des WKB-Wellenpakets (also der nullten Ordnung der Entwicklung) machen, wird somit hauptsächlich durch die Dispersion der Wellenfunktion bestimmt, wie Gl. (4.101) in eindrucksvoller Weise zeigt.

### 4.3.5 Ein Verfahren zur Berücksichtigung der Dispersion des Wellenpakets

Beim aufmerksamen Leser mag zum jetzigen Zeitpunkt der Eindruck entstanden sein, dass gerade bei sehr schmalen Wellenpaketen die Aussicht auf eine sehr genaue Beschreibung der Wellenfunktion in Anbetracht der großen Korrekturbeiträge und der schwierigen Berechnung der Integraloperatoren in höheren Ordnungen nicht sehr gut ist.

Tatsächlich werden beim IABSE Wellenpakete mit einer Breite von wenigen Ångström bis Nanometern benötigt, um bei den üblicherweise verwendeten magnetischen Feldstärken brauchbare Spinechosignale zu liefern (siehe Abschnitt 3.3). Solch ein schmales Wellenpaket im Ortsraum hätte aber eine entsprechend breite Verteilung im Impulsraum und daher eine starke Dispersion. Die Abschätzung (4.95) ist für ein solches Wellenpaket unter Umständen nicht mehr gültig, d.h. der eigentliche Entwicklungsparameter  $\epsilon$  der Reihenentwicklung nach dem Integraloperator  $\hat{K}$  ist dann nicht mehr klein gegenüber Eins. Es ist fraglich, ob die Entwicklung nach Potenzen von  $\hat{K}$  dann überhaupt noch gültig oder konvergent ist. Einen Ausweg aus dieser Situation stellt die Superposition sehr breiter Wellenpakete ohne Dispersion zu einem sehr schmalen Wellenpaket mit Dispersion dar. Wenn wir annehmen, dass für die breiten Wellenpakete die Berechnung der ersten Ordnung der Reihenentwicklung eine sehr gute Approximation an die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung liefert, sollte die Superposition der Entwicklungen zu einem schmalen Wellenpaket eine gute Approximation des eigentlich gesuchten Wellenpakets liefern. Wir wollen im Folgenden am Beispiel eines Gaußschen Wellenpakets die mathematischen Grundlagen dieser Vorgehensweise geben.

Zunächst verweisen wir auf Anhang C, wo wir einige Grundlagen über die sogenannte Gabor-Transformation [41] zusammengestellt haben, die auch als *gefensterte* Fourier-Transformation bezeichnet wird. Anstatt ein Wellenpaket aus unendlich ausgedehnten,

ebenen Wellen zu superponieren (wie bei der gewöhnlichen Fourier-Transformation), überlagert man hier Wellen (mit fester Wellenzahl) die durch eine um einen Ort  $x_0$  zentrierte Einhüllende (Fensterfunktion) abgeschnitten werden. Der tiefere Sinn hinter dieser Idee ist der, dass nur solche Basisfunktionen für die Superposition benötigt werden, die auch in dem Ortsbereich definiert sind, wo die zu superponierende Funktion von Null verschieden ist. Ein Nachteil der Gabor-Transformation ist die in ihrer Breite festgelegte Fensterfunktion. Will man eine Funktion superponieren, die im Ortsraum erheblich schmäler als die Fensterfunktion ist, so hat man ähnliche Verhältnisse wie bei der Fourier-Transformation. In diesem Fall ist die Gabor-Transformation ungeeignet und stellt sogar eine Verkomplizierung des Problems dar, da man eine eindimensionale Funktion in einen zweidimensionalen Phasenraum (Wellenzahl  $k$  und Zentrum  $x_0$  der Fensterfunktion) transformiert hat. Eine Weiterentwicklung der Gabor-Transformation ist daher die sogenannte Wavelet-Transformation, wo die Basisfunktionen eine festgelegte Anzahl von Oszillationen enthalten. Bei kleinerer Wellenlänge, also höherer Ortsauflösung, hat man also ein sehr viel schmaleres Fenster. Wavelets werden heute überall in den mathematischen und technischen Wissenschaften angewendet, insbesondere in der Bild- und Signalverarbeitung. Eine gut verständliche, einfach gehaltene Einführung in dieses sehr umfangreiche Teilgebiet der Mathematik gibt z.B. [42].

In unserem Fall bietet sich eine vereinfachte Version der Gabor Transformation an. Wir betrachten ein schmales, Gaußsches Wellenpaket mit der Breite  $2\sigma$ , das zur Zeit  $t = 0$  um einen Ort  $z = 0$  zentriert sei. In Anlehnung an Gl. (C.4) aus Anhang C machen wir den Ansatz für ein Gaußsches Wellenpaket (siehe Gl. (2.66))

$$\begin{aligned} \Psi(z, t = 0) &= \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\pi}} \exp\{i\bar{k}z\} \exp\left\{-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right\} \\ &\stackrel{!}{=} \int d\bar{k}' \tilde{\Psi}(\bar{k}' - \bar{k}) \exp\left\{-\frac{z^2}{2\kappa^2}\right\} \exp\{i\bar{k}'z\} . \end{aligned} \quad (4.102)$$

Die Breite  $\kappa$  der zu superponierenden Wellenpakete sei dabei so gewählt, dass die Abschätzung (4.95),

$$\frac{\tau}{2\bar{k}\kappa^2} \ll 1 , \quad (4.103)$$

sehr gut erfüllt ist und ferner  $\kappa \gg \sigma$  gilt. Wir gehen hier davon aus, dass ein evtl. vorhandenes Potential  $V(z)$  über die ganze Ausdehnung der sehr breiten Basisfunktionen als Null angesehen werden kann<sup>6</sup>.

Im Gegensatz zur Gabor Transformation überlagern wir hier nur solche Basisfunktionen, deren Fensterfunktion um Null zentriert ist. In dem speziellen Fall, den wir hier betrachten und der für die Zwecke dieser Arbeit völlig ausreichend ist, können wir die Transformierte  $\tilde{\Psi}(\bar{k}' - \bar{k})$  dennoch exakt berechnen. Auf der rechten Seite von Gleichung (4.102) können

---

<sup>6</sup>Ansonsten hätten wir in (4.102) den WKB-Phasenfaktor anstelle von  $\exp\{i\bar{k}'z\}$  verwenden müssen.

wir die Fensterfunktion aus dem Integral über  $\bar{k}'$  herausziehen und erhalten

$$\int d\bar{k}' \tilde{\Psi}(\bar{k}' - \bar{k}) \exp \{i\bar{k}'z\} = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\pi}} \exp \{i\bar{k}z\} \exp \left\{ -\frac{z^2}{2\sigma_{\varkappa}^2} \right\} \quad (4.104)$$

mit

$$\sigma_{\varkappa} = \sqrt{\frac{\varkappa^2 \sigma^2}{\varkappa^2 - \sigma^2}}, \quad (\varkappa \gg \sigma). \quad (4.105)$$

Auf der linken Seite von Gl. (4.104) steht eine einfache Fourier-Transformation. Wir können also  $\tilde{\Psi}(\bar{k}' - \bar{k})$  durch Fourier-Rücktransformation berechnen und erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\bar{k}' - \bar{k}) &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\pi}} \int dz \exp \left\{ -\frac{z^2}{2\sigma_{\varkappa}^2} \right\} \exp \{ -i(\bar{k}' - \bar{k})z \} \\ &= \mathcal{N}(\sigma, \sigma_{\varkappa}) \exp \left\{ -\frac{(\bar{k}' - \bar{k})^2}{2\sigma_{\varkappa}^{-2}} \right\}, \\ \mathcal{N}(\sigma, \sigma_{\varkappa}) &= \frac{\sigma_{\varkappa}}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{1}{2\pi^{3/2}} \frac{\varkappa^2 \sigma}{\varkappa^2 - \sigma^2}}. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Dieses Ergebnis ist im Grenzfall  $\sigma_{\varkappa} \rightarrow \sigma$ , d.h.  $\varkappa^2 \rightarrow \infty$ , identisch mit der Fourier-Transformierten einer Gaußfunktion aus Gl. (2.70).

Um nun die Berechnung höherer Ordnungen in der Entwicklung der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung zu vermeiden und dennoch die Dispersion zu berücksichtigen, muss man (in nullter Ordnung der Entwicklung der exakten Lösung) Wellenpakete

$$\Psi^{(0)}(\bar{k}', \varkappa, z, t) := e^{i\phi(\bar{k}', z, t)} \varphi(\varkappa, \zeta(\bar{k}', z) - \tau(\bar{k}', t)) \quad (4.107)$$

untersuchen, wobei  $\phi(\bar{k}', z, t)$ ,  $\zeta(\bar{k}', z)$  und  $\tau(\bar{k}', t)$  aus den bisher verwendeten Funktionen durch Ersetzen von  $\bar{k} \rightarrow \bar{k}'$  entstehen. Die Einhüllende ist dabei gegeben durch

$$\varphi(\varkappa, \zeta) := \exp \left\{ -\frac{\zeta^2}{2\varkappa^2} \right\}, \quad (4.108)$$

ihre Normierung wurde in die Transformierte aus Gl. (4.106) verschoben. Für jede Wellenfunktion nullter Ordnung aus Gl. (4.107) mit „mittlerer“ Wellenzahl  $\bar{k}'$  muss die Anfangsbedingung

$$\Psi(\bar{k}', \varkappa, z, t=0) = \exp \{i\bar{k}'z\} \exp \left\{ -\frac{z^2}{2\varkappa^2} \right\} \quad (4.109)$$

erfüllt sein, damit die Superposition (4.102) mit der Transformierten (4.106) das gewünschte, schmale Wellenpaket mit Breite  $\sigma$  und mittlerer Wellenzahl  $\bar{k}$  ergibt.

Aus der Einhüllenden (4.108) kann man nun mit Hilfe der Entwicklung nach Potenzen des Integraloperator  $\hat{K}$  aus (4.43) die Korrektur erster Ordnung berechnen, d.h.

$$A^{(1)}(\bar{k}', \varkappa, z, t) = \varphi(\varkappa, \zeta(\bar{k}', z) - \tau(\bar{k}', t)) + (\hat{K}\varphi)(\bar{k}', \varkappa, z, t) , \quad (4.110)$$

wobei der Dispersionsterm, der im letzten Abschnitt diskutiert wurde, bei geeigneter Wahl der Breite  $\varkappa$  bereits vernachlässigbar ist. Man kann nun die Wellenfunktion erster Ordnung aufstellen,

$$\Psi^{(1)}(\bar{k}', \varkappa, z, t) = e^{i\phi(\bar{k}', z, t)} A^{(1)}(\bar{k}', \varkappa, z, t) , \quad (4.111)$$

die immer noch die Anfangsbedingung (4.109) erfüllt. Wie in Gl. (4.102) kann damit unter Verwendung der Transformaten (4.106) das Wellenpaket

$$\Psi^{(1)}(\varkappa, z, t) = \int d\bar{k}' \tilde{\Psi}(\bar{k}' - \bar{k}) \Psi^{(1)}(\bar{k}', \varkappa, z, t) \quad (4.112)$$

superponiert werden, dass auch für Zeiten  $t > 0$  gilt.

Da (4.112) bei ausreichend großem  $\varkappa$  die Dispersion des Wellenpakets korrekt beschreibt, sind hier nur noch die Beiträge proportional zur Einhüllenden und ihrer ersten Ableitung in der Korrektur erster Ordnung relevant. Ist  $\varkappa$  ausreichend groß, verbleibt nur noch der zur Einhüllenden proportionale Beitrag. Bei entsprechend gut gewähltem Phasenwinkel wird (4.112) in diesem Fall die exakte Wellenfunktion sehr gut approximieren.

Die tatsächliche Berechnung der Superposition (4.112) kann i.A. nur numerisch durchgeführt werden und unterliegt den damit verbundenen Schwierigkeiten<sup>7</sup>. Eine detaillierte Untersuchung dieses Aspekts muss aus Zeitgründen aber leider auf zukünftige Arbeiten verschoben werden.

---

<sup>7</sup>Man kann numerisch nicht für unendlich viele Wellenzahlen  $\bar{k}'$  die erste Ordnung der Entwicklung berechnen und diese dann alle superponieren.

---



## 4.4 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Wir wollen am Ende dieses Kapitels die wesentlichen Resultate noch einmal in übersichtlicher Form festhalten.

- (1) Der in diesem Kapitel entwickelte Formalismus erlaubt die im Prinzip exakte Berechnung des Amplitudenanteils der Wellenfunktion bei vorgegebenem Phasenfaktor.
  - (2) Es handelt sich dabei um eine Entwicklung nach Potenzen eines Integraloperators  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  bzw.  $\hat{K}_C$ , siehe Gl. (4.43) mit den Operatoren  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  aus (4.20) bzw.  $\hat{L}_C$  aus (4.23).
  - (3) Die Lösung (4.39) kann auch als Entwicklung nach der inversen mittleren Wellenzahl  $1/\bar{k}$  aufgefasst werden.
  - (4) Die Entwicklung bis zur  $n$ -ten Ordnung in  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  bzw.  $\hat{K}_C$  enthält *mindestens* alle Beiträge bis zur Ordnung  $\bar{k}^{-n}$ . Beiträge höherer Ordnung dagegen *können* enthalten sein. Es hat sich gezeigt, dass dies bei der Charakteristiken-Entwicklung nicht der Fall ist, wohl aber bei der WKB-Entwicklung.
  - (5) Die WKB-Lösung (4.4) ist zur Beschreibung eines semiklassischen Wellenpakets besser geeignet als die Charakteristiken-Lösung (4.2), weil ...
    - a) ... sie die Bewegung des Schwerpunkts eines Wellenpakets durch ein Potential im klassischen Sinne richtig beschreibt, während der Schwerpunkt bei der Charakteristiken-Lösung auch im Potential mit konstanter Geschwindigkeit propagiert.
    - b) ... die WKB-Entwicklung bereits in erster Ordnung in  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  Beiträge zu beliebig hohen Ordnung in  $1/\bar{k}$  enthält, die Charakteristiken-Entwicklung aber nur Beiträge bis zur Ordnung  $1/\bar{k}$ , siehe Punkt (4).
    - c) ... in der WKB-Näherungslösung bzw. der ersten Ordnung der Entwicklung in  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  bereits viele Terme aus der Charakteristiken-Entwicklung aufsummiert sind, die proportional zu  $\tau$  sind und somit für große Zeiten beliebig groß werden können.
  - (6) Die Entwicklungen in  $\hat{K}_{\text{WKB}}$  und  $\hat{K}_C$  müssen letztendlich die gleiche Wellenfunktion liefern, was überprüft werden kann, indem man einen Koeffizientenvergleich in  $1/\bar{k}$  macht. Dies wurde für die erste Ordnung in  $1/\bar{k}$  explizit durchgeführt.
  - (7) Die Aufsummation des Phasenfaktors (4.86), der in der Charakteristiken-Entwicklung deutlich zu erkennen ist und der auch dem Phasenfaktor der Charakteristiken-Lösung (4.2) exakt entspricht, stellt offenbar eine Entwicklung des Phasenfaktors (4.87) für kleine Potentiale und kleine Zeiten dar.
-

Zusammen mit dem zeitabhängigen Anteil des Charakteristiken-Phasenfaktors ergibt der aufsummierte Phasenfaktor (4.87) unter Verwendung des Zusammenhangs zwischen den Anfangswellenpaketen  $\tilde{\varphi}$  und  $\varphi$  aus (4.82) eine Näherung der WKB-Lösung in nullter Ordnung der Entwicklung, siehe Gl. (4.89).

Dies bestätigt in eindrucksvoller Weise, dass die Wahl des WKB-Phasenfaktors als Ausgangspunkt für die Anwendung des Formalismus zur Berechnung des Amplitudenteils der Wellenfunktion nahe liegt.

- (8) Den größten Beitrag zur Korrektur liefert die in nullter Ordnung vernachlässigte Dispersion der Wellenfunktion, siehe Abschnitt 4.3.4. Ein Maß für die Größe der Korrekturbeitrag liefert der mit der Dispersion zusammenhängende Parameter  $\epsilon$  aus in Gl. (4.95). Er ist der eigentliche Entwicklungsparameter der Lösung (4.39) für WKB-ähnliche Phasenfaktoren und hängt neben der Länge  $\tau$  auch von der Breite  $\sigma$  des Wellenpakets ab. Nur wenn  $\epsilon \ll 1$  ist, kann die Dispersion des Wellenpakets und somit Beiträge höherer Ordnung vernachlässigt werden.
- (9) Um die für IABSE benötigten, sehr schmalen Wellenpakete korrekt mit dem Entwicklungsformalismus beschreiben zu können, müssen die in Abschnitt 4.3.5 behandelten Superpositionen sehr breiter Wellenpakete betrachtet werden, für die die Dispersion jeweils vernachlässigbar ist. Für diese Basiswellenpakete stellt die erste Ordnung der Entwicklung bei ausreichend großer Breite im Ortsraum eine sehr gute Approximation an die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung dar. Die Superposition der Entwicklungen der Basiswellenpakete ergibt dann die Entwicklung des gewünschten schmalen Wellenpakets inklusive Dispersion.

Im Prinzip war es spätestens am Ende von Kapitel 3 klar, dass die WKB-Näherungslösung der Charakteristiken-Näherungslösung vorzuziehen ist, denn aufgrund der realistischeren Schwerpunktsbeschreibung der WKB-Lösung waren wir bereits zu diesem Zeitpunkt in der Lage, das Fahrplanmodell theoretisch zu beschreiben und einfache IABSE-Interferenzsignale zu berechnen.

Nun allerdings haben wir, durch die Entwicklung des Formalismus zur Berechnung der exakten Lösung (4.39) der Schrödinger-Gleichung, auch die mathematische Kontrolle über die Korrekturen zur Näherungslösung. Desweiteren waren wir in der Lage, die WKB- und die Charakteristiken-Lösung quantitativ zu vergleichen und besser zu verstehen.

Bereits in der ersten Ordnung des Formalismus kann man außerdem Rückschlüsse auf Korrekturen des Phasenwinkels ziehen. Wir werden dies auch im nächsten Kapitel, wenn wir komplexe skalare Potential zulassen, in eindrucksvoller Weise demonstrieren.

Als Ausgangspunkt für die Entwicklung nehmen wir, motiviert von den bisherigen Ergebnissen, stets den WKB-Phasenwinkel oder Ergänzungen davon. Wir lassen daher im Folgenden den überflüssigen Index WKB bei Phasenwinkeln und Amplitudenfunktionen fort.

---

# Kapitel 5

---

## Implementation komplexer, skalarer Potentiale

---

### 5.1 Problemstellung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung der Theorie zur Beschreibung von LABSE-Experimenten zur Messung von paritätsverletzenden Effekten in Atomen. Wie in der Einleitung (Kap. 1) und auch in Abschnitt 2.1 bereits erwähnt, müssen wir dafür in der Lage sein, metastabile Atome zu beschreiben und wollen uns nun überlegen, wie wir dies erreichen können.

Wir erinnern uns dazu an die Zeitentwicklung des Eigenzustands  $|\Psi_E(t)\rangle$  zur Energie  $E$  eines stationären Hamiltonoperators  $H$  im Schrödinger-Bild,

$$|\Psi_E(t)\rangle = \exp \{-iE(t - t_0)\} |\Psi_E(t_0)\rangle . \quad (5.1)$$

Soll der Zustand  $|\Psi_E(t)\rangle$  ein zerfallendes Teilchen repräsentieren, so kann man dies durch Einführung komplexer Potentiale bzw. Energieeigenwerte erreichen, d.h. man setzt

$$E = V - \frac{i}{2}\Gamma , \quad \Gamma > 0 , \quad (5.2)$$

und erhält dann einen exponentiellen Abfall der Norm des Zustands gemäß

$$|\Psi_E(t)|^2 = \langle \Psi_E(t) | \Psi_E(t) \rangle = e^{-\Gamma(t-t_0)} . \quad (5.3)$$

Eine grundlegende Methode zur Beschreibung instabiler Atome liefert der Wigner-Weisskopf-Formalismus, siehe Anhang A.1, den Wigner und Weisskopf [43] bereits 1930 zur Berechnung der natürlichen Linienbreite von atomaren Übergängen entwickelt haben. Wir werden aber von diesem Formalismus erst im nächsten Kapitel 6, wenn wir das metastabile Atom betrachten werden, wirklich Gebrauch machen und uns in diesem Kapitel mit der oben motivierten Einführung eines komplexen skalaren Potentials zur Beschreibung der Wellenfunktion eines zerfallenden Teilchens begnügen.

## 5.2 Anwendung des Formalismus auf ein komplexes, skalaras Potential

### 5.2.1 Berechnung des Integraloperators

Wir betrachten also die Schrödinger-Gleichung

$$\left( \partial_z^2 - 2m[V(z) - \frac{i}{2}\Gamma(z)] + 2mi\partial_t \right) \Psi(z, t) = 0 \quad (5.4)$$

und wenden zur Lösung den in Kapitel 4 entwickelten Formalismus an. Dabei verwenden wir als Ausgangspunkt den von Gl. (5.2) motivierten, WKB-ähnlichen Phasenwinkel

$$\phi(z, t) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} + \frac{i}{2}\bar{\Gamma}t . \quad (5.5)$$

Wir weisen darauf hin, dass im WKB-Anteil dieses Phasenwinkels eine reelle, lokale Wellenzahl

$$k(z) = \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z)} \quad (5.6)$$

verwendet wurde. Auf diese Weise bleibt die Koordinate  $\zeta(z)$  ebenfalls reell und somit eindeutig umkehrbar und wir können die übliche Definition des Anteils

$$S(z) = \int_{z_0}^z dz' k(z') , \quad (5.7)$$

im Phasenwinkel beibehalten. Die Zerfallsbreite  $\bar{\Gamma}$  aus Gl. (5.5) sei eine über das Potential gemittelte Zerfallsbreite. Sollte die Wahl des Phasenwinkels nicht optimal sein, werden wir dies an den Korrekturtermen ablesen können und sind dann auch später noch in der Lage, einen besseren Phasenwinkel als Ausgangspunkt zu verwenden. Der Formalismus zur Berechnung der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung hat in diesem Sinne eine eingebaute Selbstkorrektur.

Mit dem obigen Phasenwinkel und dem Ansatz (4.6), zur Erinnerung

$$\Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} A(z, t) ,$$

erhalten wir die benötigten Ableitungen für die Schrödinger-Gleichung:

$$2mi\partial_t \Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} (2mi\partial_t + \bar{k}^2 - im\bar{\Gamma}) A(z, t) , \quad (5.8a)$$

$$\partial_z \Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} (\partial_z + i\partial_z S(z)) A(z, t) , \quad (5.8b)$$

$$\partial_z^2 \Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} (\partial_z^2 + 2ik(z)\partial_z - \bar{k}^2 + 2mV(z) + i\partial_z k(z)) A(z, t) . \quad (5.8c)$$

Damit lautet (5.4)

$$(\partial_z^2 + 2ik(z)\partial_z + i\partial_z k(z) + 2im\partial_t + im[\Gamma(z) - \bar{\Gamma}]) A(z, t) = 0 . \quad (5.9)$$

Der einzige Unterschied zu der SG (4.13) für reelles Potential ist der letzte, zusätzliche Summand in der Klammer. Wir können damit, nach Einführung der neuen Koordinaten  $\zeta(z)$  und  $\tau(t)$  aus (4.5), die Schrödinger-Gleichung sofort in der Form

$$(\partial_\zeta + \partial_\tau) B(\zeta, \tau) = (\hat{L}B)(\zeta, \tau) \quad (5.10)$$

schreiben, wobei mit  $\hat{L}_{\text{WKB}}$  aus (4.20) folgt, dass

$$\hat{L} = \hat{L}_{\text{WKB}} - \frac{m}{2\bar{k}} [\Gamma(z) - \bar{\Gamma}] = \mathcal{A}(z) + \mathcal{B}(z)\partial_\zeta + \mathcal{C}(z)\partial_\zeta^2 \quad (5.11)$$

ist und

$$\mathcal{A}(z) = -\frac{1}{2\bar{k}} \left( \partial_z k(z) + m(\Gamma(z) - \bar{\Gamma}) \right) , \quad (5.12a)$$

$$\mathcal{B}(z) = \frac{i}{2\bar{k}} \left( \partial_z \frac{\bar{k}}{k(z)} \right) , \quad (5.12b)$$

$$\mathcal{C}(z) = \frac{i}{2\bar{k}} \left( \frac{\bar{k}}{k(z)} \right)^2 . \quad (5.12c)$$

Vergleicht man dies direkt mit den entsprechenden Ergebnissen für reelles Potential, Gln. (4.56a) bis (4.56c), so erkennt man, dass hier lediglich  $\mathcal{A}(z)$  einen zusätzlichen Beitrag  $-m(\Gamma(z) - \bar{\Gamma})/(2\bar{k})$  bekommt. Wir können also die Ergebnisse aus Abschnitt 4.3.1 fast direkt übernehmen und erhalten mit dem zusätzlichen Beitrag

$$\begin{aligned} (\hat{K}\varphi)(z, t) &= \mathcal{U}(z, u(z, t))\varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &\quad + \mathcal{V}(z, u(z, t))\varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &\quad + \mathcal{W}(z, u(z, t))\varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) , \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(z, u(z, t)) &= -\frac{1}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \left( \partial_{z'} k(z') + m(\Gamma(z') - \bar{\Gamma}) \right) \\ &= \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} - \frac{1}{2} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{m\Gamma(z')}{k(z')} + \frac{1}{2} \bar{\Gamma} t , \end{aligned} \quad (5.14a)$$

$$\mathcal{V}(z, u(z, t)) = \frac{i}{4\bar{k}} \left[ \frac{\bar{k}^2}{k^2(z')} \right]_{u(z, t)}^z , \quad (5.14b)$$

$$\mathcal{W}(z, u(z, t)) = \frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z, t)}^z dz' \left( \frac{\bar{k}}{k(z')} \right)^3 . \quad (5.14c)$$

Bei der Berechnung von  $\mathcal{U}(z, u(z, t))$  haben wir die Relation

$$\int_{u(z,t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} = \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta' = \tau = \frac{\bar{k}}{m} t \quad (5.15)$$

verwendet um den Beitrag  $+\bar{\Gamma}t/2$  zu erhalten.

### 5.2.2 Berechnung der Entwicklung bis zur zweiten Ordnung

Wir haben nun bereits alle Ergebnisse, um die Wellenfunktion  $\Psi^{(1)}(z, t)$  bis zur ersten Ordnung anzugeben. Mit

$$\Psi^{(1)}(z, t) = e^{i\phi(z,t)} A^{(1)}(z, t) \quad (5.16)$$

und  $\phi(z, t)$  aus Gl. (5.5) folgt nämlich

$$\begin{aligned} A^{(1)}(z, t) = & \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \left[ 1 + \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} - \frac{1}{2} \int_{u(z,t)}^z dz' \frac{m\Gamma(z')}{k(z')} + \frac{1}{2} \bar{\Gamma}t \right] \\ & + \varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \frac{i}{4\bar{k}} \left[ \frac{\bar{k}^2}{k^2(z')} \right]_{u(z,t)}^z \\ & + \varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) \frac{i}{2\bar{k}} \int_{u(z,t)}^z dz' \left( \frac{\bar{k}}{k(z')} \right)^3 \end{aligned} \quad (5.17)$$

Wir wollen nun die Berechnung der zweiten Ordnung skizzieren. Es bietet sich hier an, die Notation so kurz wie möglich zu halten, um den Überblick nicht zu verlieren. Zunächst gehen wir wieder zu den Koordinaten  $\zeta$  und  $\tau$  über, dann ist die Amplitudenfunktion in erster Ordnung gegeben durch

$$\begin{aligned} B^{(1)}(\zeta, \tau) = & \varphi(\zeta - \tau) \left[ 1 + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\mathcal{Z}(\zeta_1)) \right] \\ & + \varphi'(\zeta - \tau) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{B}(\mathcal{Z}(\zeta_1)) \\ & + \varphi''(\zeta - \tau) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{C}(\mathcal{Z}(\zeta_1)) . \end{aligned} \quad (5.18)$$

Diese Form folgt übrigens aus jedem WKB-artigen Phasenwinkel, für den die im  $\hat{L}$ -Operator auftretenden Funktionen  $\mathcal{A}(z)$ ,  $\mathcal{B}(z)$  und  $\mathcal{C}(z)$  nicht zeitabhängig sind. Insbesondere gelten die folgenden Ergebnisse damit für den reellen WKB-Fall, den wir in Abschnitt 4.3.1 betrachtet haben.

Nun muss der Integraloperator  $\hat{K}$  auf  $(\hat{K}\varphi)(\zeta, \tau) = B^{(1)}(\zeta, \tau) - \varphi(\zeta - \tau)$  angewendet werden um die Korrektur zweiter Ordnung, d.h.  $(\hat{K}^2\varphi)(\zeta, \tau)$  zu erhalten. Dazu berechnen wir zunächst die Wirkung des Differentialoperators  $\hat{L}$  auf  $(\hat{K}\varphi)(\zeta, \tau)$  und erhalten

$$\begin{aligned}
& (\hat{L}\hat{K}\varphi)(\zeta, \tau) \\
&= \varphi(\zeta - \tau) \left[ \mathcal{A}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \mathcal{B}(\zeta) [\mathcal{A}]_{\zeta-\tau}^{\zeta} + \mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{A}']_{\zeta-\tau}^{\zeta} \right] \\
&+ \varphi'(\zeta - \tau) \left[ \mathcal{B}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \mathcal{A}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) + \mathcal{B}(\zeta) [\mathcal{B}]_{\zeta-\tau}^{\zeta} \right. \\
&\quad \left. + 2\mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{A}]_{\zeta-\tau}^{\zeta} + \mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{B}']_{\zeta-\tau}^{\zeta} \right] \\
&+ \varphi''(\zeta - \tau) \left[ \mathcal{C}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \mathcal{A}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) + \mathcal{B}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) \right. \\
&\quad \left. + 2\mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{B}]_{\zeta-\tau}^{\zeta} + \mathcal{B}(\zeta) [\mathcal{C}]_{\zeta-\tau}^{\zeta} + \mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{C}']_{\zeta-\tau}^{\zeta} \right] \\
&+ \varphi^{(3)}(\zeta - \tau) \left[ \mathcal{C}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) + \mathcal{B}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) + 2\mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{C}]_{\zeta-\tau}^{\zeta} \right] \\
&+ \varphi^{(4)}(\zeta - \tau) \left[ \mathcal{C}(\zeta) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) \right]
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Dabei sind Ausdrücke der Art  $\mathcal{A}(\zeta)$  stets als  $\mathcal{A}(\mathcal{Z}(\zeta))$  zu verstehen. Oft haben wir auch Argumente aus Platzgründen ganz weggelassen. Um  $(\hat{K}^2\varphi)(\zeta, \tau)$  aus (5.19) zu erhalten, müssen wir zunächst die Umbenennungen  $\zeta \rightarrow \zeta_2$  und  $\tau \rightarrow \tau'$  durchzuführen. Hiernach muss die Substitution  $\tau' \rightarrow \tau - \zeta + \zeta_2$  erfolgen und dann das Integral über  $\zeta_2$  von  $\zeta - \tau$  bis  $\zeta$  über den erhaltenen Ausdruck berechnet werden. Das Ergebnis ist dann der gewünschte Ausdruck  $(\hat{K}^2\varphi)(\zeta, \tau)$ , mit dem sich die gesamte Amplitudenfunktion in zweiter Ordnung aus Addition ergibt:

$$B^{(2)}(\zeta, \tau) = B^{(1)}(\zeta, \tau) + (\hat{K}^2\varphi)(\zeta, \tau) . \tag{5.20}$$

Führt man diese Rechnung durch, so folgt

$$\begin{aligned}
B^{(2)}(\zeta, \tau) = & \varphi(\zeta - \tau) \left[ 1 + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{A}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) \right. \\
& \left. + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{B}(\zeta_2) [\mathcal{A}]_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} + \mathcal{C}(\zeta) [\mathcal{A}']_{\zeta-\tau}^{\zeta} \right] \\
& + \varphi'(\zeta - \tau) \left[ \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{B}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{A}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) \right. \\
& \left. + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{B}(\zeta_2) [\mathcal{B}]_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} + 2 \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) [\mathcal{A}]_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) [\mathcal{B}']_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} \right] \\
& + \varphi''(\zeta - \tau) \left[ \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{A}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) \right. \\
& + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{B}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) + 2 \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) [\mathcal{B}]_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{B}(\zeta_2) [\mathcal{C}]_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} \\
& \left. + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) [\mathcal{C}']_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} \right] \\
& + \varphi^{(3)}(\zeta - \tau) \left[ \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{B}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{B}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) \right. \\
& \left. + 2 \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) [\mathcal{C}]_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} \right] \\
& + \varphi^{(4)}(\zeta - \tau) \left[ \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{C}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{C}(\zeta_1) \right]
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Hier erkennt man auf den ersten Blick die Komplexität des Formalismus. Bereits in zweiter Ordnung muss man zur numerischen Berechnung der Wellenfunktion an einem Ort  $z$  zur Zeit  $t$  einige geschachtelte Integrationen durchzuführen.

Was man in Gl. (5.21) leicht erkennen kann ist, dass die ersten drei Terme in der eckigen Klammer in der ersten Zeile der Gleichung offenbar zu einem Exponentialfaktor aufsum-



miert werden können:

$$\begin{aligned}
& 1 + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{A}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) \\
&= 1 + \frac{1}{1!} \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) + \frac{1}{2!} \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_2 \mathcal{A}(\zeta_2) \int_{\zeta-\tau}^{\zeta_2} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) \\
&\approx \exp \left\{ \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) \right\}
\end{aligned} \tag{5.22}$$

Man beachte, dass der Formalismus im Falle einer matrixwertigen Funktion  $\mathcal{A}(\zeta_1)$  sogar die Pfadordnung korrekt liefert. Der Ausdruck (5.22) stellt also eine Korrektur des ursprünglichen Phasenfaktors dar, was die Fähigkeit des Formalismus zur Selbstkorrektur eindrucksvoll demonstriert. Um einen sehr guten Phasenfaktor für den Formalismus zu erhalten, kann man eigentlich stets beim gewöhnlichen WKB-Phasenwinkel (2.43) starten, den Operator  $\hat{L}$  und somit  $\mathcal{A}(z)$  berechnen und kann diese Prozedur mit dem um (5.22) korrigierten Phasenfaktor wiederholen. Nach der ersten Iteration wird  $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}(z, u(z, t))$ , also eine Funktion von  $z$  und von der Untergrenzenfunktion  $u(z, t)$  aus Gl. (4.42), d.h. implizit ist  $\mathcal{A}$  dann eine Funktion von  $z$  und  $\zeta(z) - \tau(t)$ . Iteriert man erneut, so bleibt  $\zeta(z) - \tau(t)$  durch die  $\tau'$ -Substitution im Integraloperator stets erhalten<sup>1</sup> und man verbleibt bei einer Funktion  $\mathcal{A}(z, u(z, t)) = \mathcal{A}(z, \mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t)))$  auch nach weiteren Iterationen.

Wir können die Korrektur des ursprünglichen Phasenwinkels  $\phi(z, t)$  aus (5.5) direkt in der ersten Zeile der ersten Ordnung der Entwicklung der Amplitudenfunktion, Gl. (5.17), ablesen und erhalten

$$\begin{aligned}
\phi(z, t) &\rightarrow \phi(z, t) - i \int_{\zeta-\tau}^{\zeta} d\zeta_1 \mathcal{A}(\zeta_1) \\
&= -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + \int_{z_0}^z dz' \sqrt{\bar{k}^2 - 2mV(z')} + \frac{i}{2}\bar{\Gamma}t \\
&\quad - i \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} + \frac{i}{2} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{m\Gamma(z')}{k(z')} - \frac{i}{2}\bar{\Gamma}t
\end{aligned} \tag{5.23}$$

Man beachte, dass der Phasenfaktor die Exponentialfunktion des mit der imaginären Einheit  $i$  multiplizierten Phasenwinkels ist. Wir müssen also das Integral über  $\mathcal{A}$  noch mit  $-i$  multiplizieren, um die Korrektur des Phasenwinkels zu erhalten.

---

<sup>1</sup>Im Integraloperator werden alle  $\zeta' - \tau'$  zu  $\zeta - \tau$ . Der Teil der Funktion  $\mathcal{A}$ , der von  $\zeta(z) - \tau(t)$  abhängt, ist also nicht von der Integration des Operators  $\hat{K}$  betroffen.

Wieder kann man in Gl. (5.23) die Wirkung der Selbstkorrektur des Formalismus erkennen. Der ursprünglich angesetzte Anteil  $+\frac{i}{2}\bar{\Gamma}t$  im Phasenwinkel wird durch den Korrekturterm  $-\frac{i}{2}\bar{\Gamma}t$  gerade aufgehoben und durch einen anderen, offenbar geeigneteren Beitrag ersetzt, den wir z.B. in der Form

$$\frac{i}{2}\bar{\Gamma}(z, u(z, t))t := \frac{i}{2} \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{m \Gamma(z')}{k(z')} \quad (5.24)$$

schreiben können und der physikalisch sehr gut interpretiert werden kann. Der Teil

$$\frac{m}{k(z')} dz' = dt \quad (5.25)$$

ist die infinitesimale Zeit, die das Teilchen aufgrund seiner lokalen Geschwindigkeit  $v_{\text{lok}}(z') = k(z')/m$  am Ort  $z'$  verbringt. Während dieser Zeit hat es die lokale Zerfallsrate  $\Gamma(z')$ , also ist nach der Definition von Gl. (5.24)  $\bar{\Gamma}(z, u(z, t))$  nichts anderes als die über das Intervall  $[u(z, t), z]$  gemittelte Zerfallsrate. Dieses Ortsintervall entspricht nach den Ergebnissen aus Abschnitt 4.2.3 der Strecke, die das Teilchen in der Zeit  $t$  im Potential  $V(z)$  zurückgelegt hat, wenn es sich jetzt (zur Zeit  $t$ ) am Ort  $z$  befindet. Die ursprünglich angesetzte, orts- und zeitunabhängige Zerfallsrate  $\bar{\Gamma}$  wird also effektiv durch die zu jeder Zeit und an jedem Ort korrekte mittlere Zerfallsrate  $\bar{\Gamma}(z, u(z, t))$  ersetzt.

Der zweite Korrekturbeitrag des Phasenwinkels,

$$-i \ln \kappa(z, t) := -i \ln \sqrt{\frac{k(u(z, t))}{k(z)}} \quad (5.26)$$

ist eigentlich eine Korrektur der Amplitude der Wellenfunktion. Sie stellt im Falle eines stabilen Wellenpakets (d.h. wenn  $\Gamma(z) \equiv 0$ ) die Normierung des Wellenpakets zu allen Zeiten sogar in der nullten Ordnung der Entwicklung nach  $\hat{K}$  sicher. Dies wollen wir nun zeigen.

**Beweis:** Zur Zeit  $t = 0$  ist die Untergrenzenfunktion  $u(z, 0) = \mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(0)) = z$  und der Integraloperator  $\hat{K}$  aus (4.43) ist aufgrund identischer Integralgrenzen gleich Null. Damit verbleibt nur die nullte Ordnung der Entwicklung, also die homogene Lösung der Gl. (5.10) und somit (siehe auch Gl. (4.53) in Abschnitt 4.2.4) die Wellenfunktion

$$\Psi(z, t = 0) = e^{i\phi(z, 0)} \varphi(\zeta(z)) \quad (5.27)$$

Der Phasenwinkel  $\phi(z, t)$  wird für  $t = 0$  nach Gl. (5.23) identisch mit dem WKB-Phasenwinkel (2.43). Möchte man von einer auf Eins normierten Wellenfunktion ausgehen, so muss man  $\varphi(\zeta)$  derart wählen, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz |\Psi(z, t = 0)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dz |\varphi(\zeta(z))|^2 = 1 \quad (5.28)$$

erfüllt ist.

Wählt man z.B. für  $\varphi(\zeta)$  ein um  $\zeta(z) = 0$  und somit um  $z = z_0$  zentriertes Wellenpaket und ferner einen Anfangsort  $z_0$ , der so weit vor allen Feldern liegt, dass sich das Anfangswellenpaket vollständig im potentialfreien Raum befindet, dann kann man für den Bereich, in dem  $\varphi^2(\zeta(z))$  signifikant von Null verschieden ist  $\zeta(z) = z - z_0$  setzen ohne einen Fehler zu machen und man erhält

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dz |\varphi(z - z_0)|^2 . \quad (5.29)$$

Die folgenden Betrachtungen gelten aber auch im allgemeinen Fall. Für Zeiten  $t > 0$  folgt für ein stabiles Wellenpaket (d.h.  $\Gamma(z) \equiv 0$ ) mit dem Phasenwinkel  $\phi(z, t)$  aus (5.23) die Norm

$$\mathcal{N}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \kappa^2(z, t) |\varphi(\zeta(z) - \tau(t))|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{k(u(z, t))}{k(z)} |\varphi(\zeta(z) - \tau(t))|^2 . \quad (5.30)$$

Nun führen wir die Substitution

$$u = u(z, t) \stackrel{(4.42)}{=} \mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t)) \quad (5.31)$$

durch, wobei wir die Zeit  $t$  festhalten wollen. Demnach folgt

$$\zeta(z) - \tau(t) = \zeta(u(z, t)) = \zeta(u) \quad (5.32)$$

und

$$du = \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} dz \stackrel{(5.37)}{=} \kappa^2(z, t) dz = \frac{k(u(z, t))}{k(z)} dz . \quad (5.33)$$

Wir haben hier ein wenig vorgegriffen und auf die Ableitung von  $u(z, t)$  nach  $z$ , die wir in Gl. (5.37) berechnen werden, verwiesen. Die Grenzen des Integrals bleiben auch bei der Integration über  $u$  unverändert, es folgt also

$$\mathcal{N}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} du |\varphi(\zeta(u))|^2 \stackrel{(5.28)}{=} 1 , \quad (5.34)$$

was nach Voraussetzung, Gl. (5.28), gleich Eins ist.

**q.e.d.**

### 5.3 Berechnung der Entwicklung mit korrigiertem Phasenfaktor und Amplitude

Motiviert vom Ergebnis des letzten Abschnitts berechnen wir nun die Entwicklung der Wellenfunktion mit Hilfe des neuen Phasenwinkels (5.23),

$$\phi(z, t) = -\frac{\bar{k}^2}{2m}t + S(z) + \frac{i}{2} \int_{u(z,t)}^z dz' \frac{m\Gamma(z')}{k(z')} - i \ln \kappa(z, t) . \quad (5.35)$$

mit  $\kappa(z, t)$  aus (5.26),  $u(z, t)$  aus (4.42) und  $S(z)$  aus (5.7).

Um die Lesbarkeit der Formeln zu erhöhen, werden wir ab jetzt meist auf die Angabe des Arguments  $(z, t)$  bei den Funktionen  $u \equiv u(z, t)$  und  $\kappa \equiv \kappa(z, t)$  verzichten und ebenso bei deren Ableitungen. Weiterhin führen wir die folgende abkürzende Schreibweise

$$[[f]]_u^z := [f(z')]_{u(z,t)}^z = f(z) - f(u(z, t)) \quad (5.36)$$

für die Differenzen einer rein  $z$ -abhängigen Funktion an den Stellen  $z$  und  $u(z, t)$  ein.

Bei der Anwendung der  $\hat{L}$ -Operators werden wir diverse Ableitungen der Funktionen  $u(z, t)$  und  $\kappa(z, t)$  benötigen. Diese wollen wir zunächst zusammenstellen. Es gilt

$$\partial_z u = \frac{d\mathcal{Z}(\zeta)}{d\zeta} \Big|_{\zeta(z)-\tau(t)} \frac{d\zeta(z)}{dz} = \frac{k(z(\zeta(z) - \tau(t)))}{k(z)} = \frac{k(u(z, t))}{k(z)} = \kappa^2 \quad (5.37)$$

und

$$\partial_t u = -\frac{d\mathcal{Z}(\zeta)}{d\zeta} \Big|_{\zeta(z)-\tau(t)} \frac{d\tau(t)}{dt} = -\frac{k(u(z, t))}{m} . \quad (5.38)$$

Die Orts- und Zeitableitungen von  $\kappa(z, t)$  berechnen sich zu

$$\partial_t \kappa = -\frac{\kappa}{2} \frac{\partial_z k(z)}{m} \Big|_{z=u} , \quad (5.39a)$$

$$\partial_z \kappa = -\frac{\kappa}{2} \frac{[[\partial_{z'} k]]_u^z}{k(z)} , \quad (5.39b)$$

$$\partial_z^2 \kappa = \kappa \left( \frac{[[\partial_{z'} k]]_u^z}{2k(z)} \right)^2 + \frac{\kappa}{2k^2(z)} \left( [[\partial_{z'} k]]_u^z \partial_z k(z) - [[(\partial_{z'}^2 k)k]]_u^z \right) , \quad (5.39c)$$

dabei bedeutet nach der Definition aus Gl. (5.36) z.B.

$$[[\partial_{z'} k]]_u^z = [\partial_{z'} k(z')]_{z'=u(z,t)}^{z'=z} = \partial_{z'} k(z') \Big|_{z'=z} - \partial_{z'} k(z') \Big|_{z'=u(z,t)} . \quad (5.40)$$

Mit dem Phasenwinkel (5.35) und dem Ansatz (4.6),

$$\Psi(z, t) = e^{i\phi(z, t)} A(z, t) ,$$

lautet die Schrödinger-Gleichung (5.4) nach Berechnung und Einsetzen aller Ableitungen von  $\Psi(z, t)$  schließlich

$$(\partial_z^2 + Q(z, u(z, t))\partial_z + R(z, u(z, t)) + 2im\partial_t) A(z, t) = 0 , \quad (5.41)$$

wobei die hier eingeführten Hilfsfunktionen definiert sind als

$$Q(z, u(z, t)) = 2i\partial_z\phi(z, t) = 2i \left( k(z) + \frac{i \llbracket \partial_{z'} k + m\Gamma \rrbracket_u^z}{2k(z)} \right) \quad (5.42)$$

und

$$\begin{aligned} R(z, u(z, t)) &= i\partial_z^2\phi(z, t) - (\partial_z\phi(z, t))^2 - 2m\partial_t\phi(z, t) - 2mV(z) + im\Gamma(z) \\ &= \frac{\left( \partial_z k(z) + \frac{1}{2} \llbracket \partial_{z'} k + m\Gamma \rrbracket_u^z \right) \llbracket \partial_{z'} k + m\Gamma \rrbracket_u^z - \llbracket k((\partial_{z'}^2 k) + m\partial_{z'}\Gamma) \rrbracket_u^z}{2k^2(z)} . \end{aligned} \quad (5.43)$$

Wie bei der Verwendung von WKB-artigen Phasenfaktoren üblich, gehen wir auch hier zu den Koordinaten  $\zeta(z)$  und  $\tau(t)$  aus (4.5) über und erhalten dann wieder eine Schrödinger-Gleichung in der Form (4.26),

$$(\partial_\zeta + \partial_\tau)B(\zeta, \tau) = (\hat{L}B)(\zeta, \tau) , \quad (5.44)$$

mit dem Differentialoperator

$$\begin{aligned} \hat{L} &= \frac{i}{2\bar{k}} \left[ R(z, u(z, t)) + \left( \left( \partial_z \frac{\bar{k}}{k(z)} \right) - \frac{\bar{k} \llbracket \partial_{z'} k + m\Gamma \rrbracket_u^z}{k^2(z)} \right) \partial_\zeta + \left( \frac{\bar{k}}{k(z)} \right)^2 \partial_\zeta^2 \right] \\ &=: \mathcal{A}_1(z, u(z, t)) + \mathcal{B}_1(z, u(z, t))\partial_\zeta + \mathcal{C}(z)\partial_\zeta^2 , \end{aligned} \quad (5.45)$$

wobei wir in Analogie zu (5.11) wieder die Hilfsfunktionen  $\mathcal{A}_1$  usw. definiert haben. Der Index soll verdeutlichen, dass es sich um die erste mit dem Formalismus berechnete Korrektur der Funktion  $\mathcal{A}(z)$  aus (5.12a) bzw.  $\mathcal{B}(z)$  aus (5.12b) handelt. Wie bereits in der Diskussion nach Gl. (5.22) bemerkt, hängen die Hilfsfunktionen nach der Verwendung des korrigierten Phasenwinkels (5.35) nicht nur von  $z$ , sondern auch von  $u(z, t)$  ab. Lediglich die Funktion  $\mathcal{C} = \mathcal{C}(z)$  bleibt zeitunabhängig und wird dies auch in allen weiteren Korrekturen bleiben, da sie aus der Variablentransformation  $z \rightarrow \zeta(z)$  in der Schrödinger-Gleichung entsteht.

Der Integraloperator berechnet sich nun analog zu (5.13) aus

$$\begin{aligned} (\hat{K}\varphi)(z, t) &= \mathcal{U}(z, u(z, t))\varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &\quad + \mathcal{V}(z, u(z, t))\varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &\quad + \mathcal{W}(z, u(z, t))\varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) , \end{aligned} \quad (5.46)$$

wobei hier z.B.

$$\mathcal{U}(z, u(z, t)) = \int_{u(z, t)}^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \mathcal{A}_1(z', u(z', t' = t - \frac{m}{k}\zeta(z) - \frac{m}{k}\zeta(z'))) \quad (5.47)$$

ist. Nun gilt aber, wie in der Diskussion nach Gl. (5.22) bereits prophezeit,

$$\begin{aligned} u(z', t' = t - \frac{m}{k}\zeta(z) - \frac{m}{k}\zeta(z')) &= \mathcal{Z}(\zeta(z') - \tau(t - \frac{m}{k}\zeta(z) - \frac{m}{k}\zeta(z'))) \\ &= \mathcal{Z}(\zeta(z') - \frac{\bar{k}}{m}t + \zeta(z) - \zeta(z')) \\ &= \mathcal{Z}(\zeta(z) - \tau(t)) \\ &= u(z, t) , \end{aligned} \quad (5.48)$$

d.h. die Abhängigkeit einer Funktion von  $u(z, t)$  bleibt im Integraloperator unberührt erhalten. Demzufolge ist

$$\mathcal{U}(z, u(z, t)) = \left[ \int_u^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \mathcal{A}_1(z', u) \right]_{u=u(z, t)} , \quad (5.49a)$$

$$\mathcal{V}(z, u(z, t)) = \left[ \int_u^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \mathcal{B}_1(z', u) \right]_{u=u(z, t)} , \quad (5.49b)$$

$$\mathcal{W}(z, u(z, t)) = \left[ \int_u^z dz' \frac{\bar{k}}{k(z')} \mathcal{C}(z') \right]_{u=u(z, t)} . \quad (5.49c)$$

Mit diesen Funktionen können wir die Entwicklung der Amplitudenfunktion  $A^{(1)}(z, t)$  in kurzer Form schreiben als

$$\begin{aligned} A^{(1)}(z, t) &= \varphi(\zeta(z) - \tau(t)) \left[ 1 + \mathcal{U}(z, u(z, t)) \right] \\ &\quad + \varphi'(\zeta(z) - \tau(t)) \mathcal{V}(z, u(z, t)) + \varphi''(\zeta(z) - \tau(t)) \mathcal{W}(z, u(z, t)) \end{aligned} \quad (5.50)$$

## 5.4 Diskussion und Vergleich der beiden Entwicklungen

Wir vergleichen nun die Entwicklungen (5.17) und (5.50) mit altem und neuen Phasenwinkel.

Nach (5.12a) ist

$$\mathcal{A}(z) = -\frac{\partial_z k(z)}{2k} + \frac{m(\Gamma(z) - \bar{\Gamma})}{2k} \quad (5.51)$$


---

und nach (5.45)

$$\mathcal{A}_1(z, u(z, t)) = \frac{i}{2\bar{k}} R(z, u(z, t)) \quad (5.52)$$

mit  $R(z, u(z, t))$  aus (5.43). Wie in Abschnitt 4.3.3 wollen wir wieder einen Vergleich der Ordnung in  $1/\bar{k}$  machen, um zu sehen, welche der beiden Funktionen zu größeren Korrekturen der Wellenfunktion führen wird.

Man sieht leicht, dass  $\mathcal{A}(\zeta) = \mathcal{O}(1/\bar{k})$  ist, denn der Anteil  $\partial_z k(z)/2\bar{k} = -mV(z)/(\bar{k}k(z))$  ist offensichtlich von der Ordnung  $1/\bar{k}^2$  und es verbleibt dann nur noch der zu  $\Gamma(z) - \bar{\Gamma}$  proportionale Term  $m(\Gamma(z) - \bar{\Gamma})/2\bar{k}$ .

Bei genauerer Untersuchung von  $\mathcal{A}(z, u(z, t))$  unter Verwendung der Definition von  $R(z, u(z, t))$  aus (5.43) findet man dagegen heraus, dass der führende Term in Entwicklung nach Potenzen von  $1/\bar{k}$

$$\mathcal{A}_1(z, u(z, t)) \approx \frac{m \llbracket k \partial_z \Gamma \rrbracket_u^z}{(4\bar{k}k^2(z))} = \mathcal{O}(1/\bar{k}^2) \quad (5.53)$$

lautet, d.h.  $\mathcal{A}_1(z, u(z, t))$  führt zu Korrekturen, die um eine Ordnung in  $1/\bar{k}$  höher liegen als die durch  $\mathcal{A}(z)$  verursachten Korrekturen.

Die Ordnung der Korrekturfunktionen  $\mathcal{B}(\zeta)$  aus (5.12b) und  $\mathcal{B}_1(z, u(z, t))$  aus (5.45) ist gleich, da beide den  $\partial_z(\bar{k}/k(z))$ -Term enthalten, der von der Ordnung  $1/\bar{k}^2$  und es in  $\mathcal{B}_1(z, u(z, t))$  keine Beiträge niedrigerer Ordnung gibt.

Gegenüber dem alten Phasenwinkel hat sich an dieser Stelle der Entwicklung nach Potenzen des Integraloperators  $\hat{K}$  also keine wesentliche Verbesserung ergeben. Auch zukünftige Korrekturen (in weiteren Iterationsschritten) könnten dies nicht leisten, da der führende Beitrag in  $\mathcal{B}_1(z, u(z, t))$  aus der Koordinatentransformation  $z \rightarrow \zeta(z)$  stammt und deshalb stets von der Ordnung  $1/\bar{k}^2$  ist.

Aus demselben Grund bleibt der nach wie vor größte Korrekturbeitrag bei der Anwendung des Formalismus zur Berechnung der exakten Wellenfunktion der Beitrag  $\mathcal{C}(z)$ , der vor der zweiten Ableitung nach  $\zeta$  steht und der aus der Vernachlässigung der Dispersion des Wellenpakets stammt. Er ist eine Korrektur erster Ordnung in  $\mathcal{O}(1/\bar{k})$ , siehe Gl. (4.74), und wurde in Abschnitt 4.3.3 ausführlich diskutiert. Da die Korrektur des Phasenwinkels (bzw. der Amplitude über Logarithmus-Beiträge zum Phasenwinkel) offenbar keine Auswirkungen auf diesen Beitrag der Entwicklung in  $\hat{K}$  hat, ist die Fähigkeit der Entwicklungsmethode zur formalen Korrektur des WKB-Phasenwinkels eigentlich auf den ersten Iterationsschritt begrenzt. Man kann zwar auch höhere Ordnungen von  $1/\bar{k}$  in den Phasenwinkel mit aufnehmen, doch es stellt sich dann stets die Frage, ob die damit erzielte Verbesserung der Genauigkeit des Ansatzes den wachsenden numerischen Rechenaufwand wert ist, den die Verwendung eines komplizierteren Phasenwinkels mit sich bringt.

Zur Minimierung des zu  $\mathcal{C}(z)$  proportionalen Beitrags in der Entwicklung muss man wieder das in Abschnitt 4.3.5 erläuterte Verfahren anwenden, nachdem man sich für einen geeigneten Phasenfaktor entschieden hat. Wählt man die für dieses Verfahren benötigten Wellenpakete breit genug, so kann auch eine Vernachlässigung des Entwicklungsbeitrags, der proportional zur ersten Ableitung nach  $\zeta$  ist, in Betracht gezogen werden.

Nachdem wir nun einen geeigneten Phasenwinkel zur Beschreibung eines zerfallenden Wellenpakets gefunden haben, wollen wir im nächsten Kapitel den Übergang zu allgemeinen, matrixwertigen Potentialen vollziehen. Wir werden sehen, dass, obwohl dieser Schritt mit den bisher erzielten Resultaten vergleichsweise einfach ist, der Grad der Komplexität der physikalischen Beschreibung und der mathematische Aufwand enorm steigen wird.



# Kapitel 6

---

## Atome mit mehreren inneren Zuständen in matrixwertigen Potentialen

---

### 6.1 Aufstellen der Schrödinger-Gleichung

Bisher haben wir eindimensionale Wellenpakete betrachtet, die nicht speziell auf die Beschreibung von Atomen ausgelegt waren. Wie bereits im vorgreifenden Abschnitt 3.3.1 erläutert, kann das Atom als Superposition mehrerer, innerer Zustände beschrieben werden, die sich durch gewisse Quantenzahlen unterscheiden. Jeder Zustand bekommt dann ein eigenes Wellenpaket, siehe Gl. (3.58). Um in diesem Kapitel möglichst schnell zu Ergebnissen zu kommen haben wir die Grundlagen zur Beschreibung wasserstoffartiger Atome in den Anhang A verlegt. Wir wollen hier nur einen kurzen Überblick über diese Grundlagen geben.

Wasserstoffartige Atome lassen sich als quantenmechanisches Zweiteilchen-Problem behandeln, siehe Anhang A.2. Die aufgrund der Kopplung der Drehimpulse von Elektron und Atomkern zu unterscheidenden inneren Zustände des Atoms führen bei vorhandenen externen Einflüssen zu einem matrixwertigen Potential, siehe Gl. (A.38). Bei der Darstellung dieser Matrix unterscheiden wir streng zwischen zwei Möglichkeiten. Eine mögliche Wahl der Basiszustände, die sich insbesondere für die numerische Behandlung anbietet, sind die Zustände mit Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{F}$ , der sich aus den gekoppelten Drehimpulsen des Elektrons (Spin  $\mathbf{S}$  und Bahndrehimpuls  $\mathbf{L}$  zu  $\mathbf{J}$ ) und dem Kernspin  $\mathbf{I}$  zusammensetzt, siehe Gl. (A.27). Eine weitere mögliche Basis sind die lokalen Eigenzustände der Potentialmatrix  $\mathcal{M}(Z)$ , die wir mit  $|\alpha(Z)\rangle$  bezeichnen wollen. Für diese gilt

$$\mathcal{M}(Z)|\alpha(Z)\rangle = E_\alpha(Z)|\alpha(Z)\rangle, \quad (\alpha = 1, \dots, N), \quad (6.1)$$

wobei  $N$  die Dimension des durch die inneren atomaren Zustände aufgespannten Hilbert-Raums sei. Wie in Anhang A.1 ausführlich diskutiert, kann man im Fall metastabiler

Atome mit dem Wigner-Weisskopf-Formalismus [43] die Potentialmatrix im Unterraum der atomaren Zustände mit Hauptquantenzahl  $n = 2$  in der Form

$$\underline{\mathcal{M}}(Z) = \underline{V}(Z) - \frac{i}{2}\underline{\Gamma}(Z) \quad (6.2)$$

schreiben und spricht dann von einer sogenannten nichthermiteschen Massen- oder Energiematrix<sup>1</sup>. Die Eigenwerte  $E_\alpha(Z)$  aus Gl. (6.1) werden dann komplex und man muss zwischen rechten und linken Eigenzuständen unterscheiden. Für die linken Eigenzustände, die wir mit einer zusätzlichen Tilde kennzeichnen wollen, gilt die Eigenwertgleichung

$$(\alpha(\widetilde{Z})|\underline{\mathcal{M}}(Z) = E_\alpha(Z)(\alpha(\widetilde{Z})|, \quad (\alpha = 1, \dots, N) . \quad (6.3)$$

Für die linken und rechten Eigenvektoren gilt die Orthonormalitätsrelation (A.20), die rechten Eigenvektoren können außerdem zusätzlich normiert werden. Die Eigenenergien kann man in Real- und Imaginärteil aufspalten, d.h.

$$E_\alpha(Z) = \text{Re } E_\alpha(Z) + i \text{Im } E_\alpha(Z) =: V_\alpha(Z) - \frac{i}{2}\Gamma_\alpha(Z) . \quad (6.4)$$

Die (lokalen) totalen Zerfallsbreiten  $\Gamma_\alpha(Z)$  müssen analog zum eindimensionalen Fall aus Gl. (5.2) stets positiv sein, ansonsten würde die Norm des Eigenzustands exponentiell anwachsen. Für weitere Informationen zur Beschreibung des Zerfalls eines metastabilen Atoms verweisen wir auf Anhang A.1. Wir wollen betonen, dass der im Folgenden entwickelte Formalismus ohne weiteres auch auf den Fall stabiler Atome angewendet werden kann, wo  $\underline{\mathcal{M}}$  eine hermitesche Matrix ist und  $\Gamma_\alpha(Z) \equiv 0$  für alle Indizes  $\alpha$  gilt.

Wie am Ende von Anhang A.2 diskutiert, lautet bei Verwendung der Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}(Z)$  die Schrödinger-Gleichung (A.41)

$$\left( \partial_Z^2 - 2M\underline{\mathcal{M}}(Z) + 2Mi\partial_t \right) |\Psi(Z, t)\rangle = 0 , \quad (6.5)$$

wobei  $M$  die Gesamtmasse des Atoms sei. Nun denken wir uns das lokalen Eigenwertproblem (6.1) als gelöst und machen den bereits in (3.58) betrachteten, lokalen Ansatz

$$|\Psi(Z, t)\rangle = \sum_\alpha \Psi_\alpha(Z, t) |\alpha(Z)\rangle \quad (6.6)$$

und berechnen damit die Ableitungen, die in der Gl. (6.5) vorkommen. Es gilt

$$2Mi\partial_t |\Psi(Z, t)\rangle = 2Mi \sum_\alpha (\partial_t \Psi_\alpha(Z, t)) |\alpha(Z)\rangle , \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned} \partial_Z^2 |\Psi(Z, t)\rangle = \sum_\alpha \left[ (\partial_Z^2 \Psi_\alpha(Z, t)) |\alpha(Z)\rangle + \Psi_\alpha(Z, t) (\partial_Z^2 |\alpha(Z)\rangle) \right. \\ \left. + 2(\partial_Z \Psi_\alpha(Z, t)) (\partial_Z |\alpha(Z)\rangle) \right] , \end{aligned} \quad (6.8)$$

---

<sup>1</sup> Der Begriff Massenmatrix wurde aus der Anwendung des Wigner-Weisskopf-Formalismus auf den Zerfall der K-Mesonen übernommen. Der Wigner-Weisskopf-Formalismus, den wir in Anhang A.1 präsentieren, richtet sich nach der sehr empfehlenswerten Darstellung aus [44], Anhang I. Dort wird auch der Zusammenhang mit dem Zerfall der K-Mesonen behandelt.

---

und somit folgt nach Einsetzen in (6.5)

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} [(\partial_Z^2 - 2ME_{\alpha}(Z) + 2Mi\partial_t)\Psi_{\alpha}(Z, t)] |\alpha(Z)\rangle \\ &= \sum_{\alpha} \left[ -2(\partial_Z\Psi_{\alpha}(Z, t))[\partial_Z|\alpha(Z)\rangle] - \Psi_{\alpha}(Z, t)[\partial_Z^2|\alpha(Z)\rangle] \right]. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Wir projizieren nun von links mit einem linken Eigenvektor  $(\widetilde{\beta(Z)})|$  und erhalten daraus unter Verwendung der Orthonormalität (A.20) der linken und rechten Eigenvektoren

$$\begin{aligned} & (\partial_Z^2 - 2ME_{\beta}(Z) + 2Mi\partial_t)\Psi_{\beta}(Z, t) \\ &= \sum_{\alpha} \left[ -2(\partial_Z\Psi_{\alpha}(Z, t))((\widetilde{\beta(Z)})|\partial_Z|\alpha(Z)\rangle) - \Psi_{\alpha}(Z, t)((\widetilde{\beta(Z)})|\partial_Z^2|\alpha(Z)\rangle) \right]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Der nächste Schritt wäre die Wahl eines speziellen WKB-ähnlichen Phasenwinkels  $\phi_{\alpha}(Z, t)$  und das Einsetzen des Ansatzes

$$\Psi_{\alpha}(Z, t) = e^{i\phi_{\alpha}(Z, t)} A_{\alpha}(Z, t). \quad (6.11)$$

Bevor wir  $\phi_{\alpha}(Z, t)$  angeben können, müssen wir einen genaueren Blick auf die Gesamtenergie der einzelnen Wellenpakete werfen. Betrachten wir dazu einmal den adiabatischen Grenzfall, d.h. die Potentiale seien derart gewählt, dass Mischungen der Zustände aufgrund der Ortsableitungen auf der rechten Seite von (6.10) vernachlässigt werden können. In diesem Fall ist die rechte Seite von (6.10) ungefähr Null und wir haben es mit unabhängigen Gleichungen für jede Komponente  $\beta$  zu tun, die wir jeweils genauso behandeln können, wie die eindimensionale Schrödinger-Gleichung in den vergangenen Kapiteln.

Die Schwierigkeit hier ist allerdings die Wahl der (mittleren) Gesamtenergie der Wellenpakete. Wählen wir die gleiche Gesamtenergie für alle Wellenpakete, so setzt diese sich im feldfreien Raum nach der Diskussion in Anhang (A.2) aus der kinetischen und der inneren Energie zusammen. Zustände mit unterschiedlicher innerer Energie (z.B. im Termschema des Atoms) hätten dann unterschiedliche Geschwindigkeiten im feldfreien Raum und die korrespondierenden Wellenpakete in der WKB-Näherung würden auseinanderdriften. Durch Einführung unterschiedlicher Gesamtenergien kann dies verhindert werden und dies ist auch der Ansatz, den wir hier machen wollen.

Letztendlich hängt es von der experimentellen Präparation des Anfangszustands ab. Startet der Experimentator mit einem Atom, dass mit nur einem einzigen inneren Zustand beschrieben werden kann, so kann man durch nichtadiabatische Potentiale Superpositionen von inneren Zuständen erzeugen. Die zugehörigen Wellenpakete hätten in diesem Fall alle die gleiche Gesamtenergie und somit unterschiedliche Schwerpunktsgeschwindigkeiten.

Startet der Experimentator mit einem Atom im Grundzustand, generiert die angeregten Zustände dann durch unterschiedliche Energiezufuhr und präpariert dann den gewünschten Anfangszustand (z.B. mit einer Stern-Gerlach-Methode), so sollten die Wellenpakete

der einzelnen Zustände unterschiedliche Gesamtenergien haben, aber gleiche kinetische Energien, d.h.

$$E_\beta^{\text{ges}}(Z) = \frac{\bar{k}^2}{2M} + V_\beta(Z) . \quad (6.12)$$

Wir wollen diesen Fall hier untersuchen. Der Fall identischer Gesamtenergien, der immer dann relevant wird, wenn der Anfangszustand über ein statisches Potential aus einem einzelnen inneren atomaren Zustand präpariert wird, kann aus Zeitgründen in der vorliegenden Arbeit nicht mehr behandelt werden, sollte aber mit den hier aufgestellten Formeln relativ leicht zugänglich sein. Für alle Experimente, an die wir (nicht nur im Rahmen dieser Arbeit) denken, wird ohnehin ein Anfangszustand von Wasserstoff oder Deuterium aus metastabilen Zuständen mit gleichem Gesamtdrehimpuls ausreichend sein. Da diese Zustände im feldfreien Fall entartet sind, sind beide Betrachtungsweisen in diesem Fall äquivalent.

Gehen wir also davon aus, dass sich im Anfangszustand des Atoms, der am Ort  $Z_0$  im feldfreien Raum vorliegen soll, nur Wellenpakete mit Gesamtenergien

$$E_\alpha^{\text{ges}} := \frac{\bar{k}^2}{2M} + V_\alpha(Z_0) . \quad (6.13)$$

befinden. Dann ist die lokale Wellenzahl am Ort  $Z$  für den Zustand mit Index  $\alpha$  gegeben durch

$$k_\alpha(Z) = \sqrt{2ME_\alpha^{\text{ges}} - 2MV_\alpha(Z)} = \sqrt{\bar{k}^2 - 2M\Delta V_\alpha(Z)} \quad (6.14)$$

mit

$$\Delta V_\alpha(Z) := V_\alpha(Z) - V_\alpha(Z_0) . \quad (6.15)$$

Für den zeitabhängigen Anteil des Phasenfaktors definieren wir

$$\bar{k}_\alpha := \sqrt{2ME_\alpha^{\text{ges}}} = \sqrt{\bar{k}^2 + 2MV_\alpha(Z_0)} \quad (6.16)$$

Mit diesen Definitionen ist im adiabatischen Grenzfall die ebene Welle

$$\psi_\beta(\bar{k}, Z, t) = \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}_\beta^2}{2M} t + i \int_{Z_0}^Z dZ' k_\beta(Z') \right\} \quad (6.17)$$

eine Lösung mit Wellenzahl  $\bar{k}$  der Schrödinger-Gleichung (6.10) im Sinne der WKB-Näherung. Aus Überlagerung von ebenen Wellen dieses Typs mit Wellenzahlen  $k$  würden wir in Analogie zu Abschnitt 2.3 Wellenpakete der Form

$$\Psi_\beta(Z, t) \approx \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}_\beta^2}{2M} t + i \int_{Z_0}^Z dZ' k_\beta(Z') \right\} \varphi(\zeta_\beta(Z) - \tau(t)) \quad (6.18)$$


---

erhalten, wobei die Koordinaten  $\zeta_\beta(Z)$  und  $\tau(t)$  definiert sind als

$$\zeta_\beta(Z) = \int_{Z_0}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_\beta(Z')} , \quad \tau(t) = \frac{\bar{k}}{M} t , \quad (6.19)$$

mit  $k_\beta(Z)$  aus Gl. (6.14).

Durch die Verwendung der eben definierten Größen ist, wie oben bereits behauptet, sichergestellt, dass im feldfreien Bereich alle Komponenten-Wellenpakete eine identische, mittlere Geschwindigkeit  $\bar{k}/M$  haben. Es gilt ja im feldfreien Raum nach Definition

$$V_\beta(Z) \rightarrow V_\beta(Z_0) \Rightarrow \Delta V_\beta(Z) \rightarrow 0 \Rightarrow k_\beta(Z) \rightarrow \bar{k} . \quad (6.20)$$

Die Schwerpunktschwindigkeit des Wellenpakets mit Index  $\beta$  berechnet sich - wie am Ende von Abschnitt 2.3.2 bereits diskutiert - aus

$$0 = \frac{d}{dt} \left( \zeta_\beta(\hat{Z}_\beta(t)) - \tau(t) \right) \implies \frac{d\hat{Z}_\beta(t)}{dt} = \frac{k_\beta(\hat{Z}_\beta(t))}{M} \quad (6.21)$$

und somit folgt wegen  $k_\beta(Z) \rightarrow \bar{k}$  im feldfreien Raum die Behauptung. Aus (6.21) folgt mit (6.14) für das betrachtete Komponenten-Wellenpaket weiterhin eine Energieerhaltungsgleichung

$$\frac{1}{2} M \left( \frac{d\hat{Z}_\beta(t)}{dt} \right)^2 + V_\beta(Z) = \frac{\bar{k}_\beta^2}{2M} = E_\beta^{\text{ges}} . \quad (6.22)$$

Für die potentiellen Energien  $V_\beta(Z)$ , die ja der Realteil des komplexen Eigenwerts  $E_\beta(Z)$  der nichthermiteschen Massenmatrix  $\mathcal{M}$  ist, kann man durch die relative Definition (6.14) der lokalen Wellenzahl den Nullpunkt frei wählen, ohne dass sich die Schwerpunktschwindigkeiten ändern.

Kommen wir nun zurück zur Schrödinger-Gleichung (6.10), die wir ja in eine zu (4.26) analoge Form bringen müssen, um den Formalismus zur Berechnung der exakten Lösung auf den Fall matrixwertiger Potential übertragen zu können.

In Kapitel 5 haben wir bereits in Gl. (5.35) einen guten Phasenwinkel für den Ansatz (6.11) für die Wellenfunktion berechnet. Wir müssen ihn nur noch auf den hier betrachteten Fall übertragen, was aber nach den eben gemachten Vorbetrachtungen kein Problem mehr darstellt. Ohnehin wäre die Wahl eines ungeeigneten Phasenwinkels nach den Ergebnissen aus Kapitel 5 nicht allzu tragisch, da wir dann leicht aus den Korrekturen erster Ordnung auf einen geeigneteren Phasenwinkel schließen könnten. Wir wählen also den aus (5.35)

und der obigen Diskussion motivierten Phasenwinkel

$$\begin{aligned} \phi_\alpha(Z, t) = & -\frac{\bar{k}_\alpha^2}{2M}t + S_\alpha(Z) + i \int_{u_\alpha(Z, t)}^Z dZ' (\alpha(\widetilde{Z}') | \partial_{Z'} | \alpha(Z')) \\ & + \frac{i}{2} \int_{u_\alpha(Z, t)}^Z dZ' \frac{M\Gamma_\alpha(Z')}{k_\alpha(Z')} - i \ln \kappa_\alpha(Z, t) \end{aligned} \quad (6.23)$$

mit

$$\Gamma_\alpha(Z) := -2 \operatorname{Im}(E_\alpha(Z)) , \quad (6.24)$$

$$S_\alpha(Z) := \int_{Z_0}^Z dZ' k_\alpha(Z') , \quad (6.25)$$

$$\kappa_\alpha(Z, t) := \sqrt{\frac{k_\alpha(u_\alpha(Z, t))}{k_\alpha(Z)}} \quad (6.26)$$

und

$$u_\alpha(Z, t) := \mathcal{Z}_\alpha(\zeta_\alpha(Z) - \frac{\bar{k}}{M}t) , \quad (6.27)$$

wobei  $\mathcal{Z}_\alpha(\zeta)$  die Umkehrfunktion zu  $\zeta_\alpha(Z)$  ist. Der im Vergleich zu (5.35) neu hinzugekommene Anteil

$$\phi_\alpha^{\text{geom}}(Z, t) = i \int_{u_\alpha(Z, t)}^Z dZ' (\alpha(\widetilde{Z}') | \partial_{Z'} | \alpha(Z')) \quad (6.28)$$

ist motiviert durch das diagonale Matricelement der Ortsableitung auf der rechten Seite von Gl. (6.10). Die physikalische Interpretation dieses Anteils ist der einer geometrischen Phase, die der Zustand  $|\alpha(Z)\rangle$  auf seinem Weg durch das Potential aufammelt. Wir werden uns in Kapitel 7 intensiv mit diesem Anteil des Phasenwinkels beschäftigen, wenn wir P-verletzende geometrischen Phasen untersuchen.

Durch eine Rechnung, die analog zu der in Abschnitt 5.3 verläuft, erhält man aus (6.10) die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} & e^{i\phi_\beta(Z, t)} \left[ 2i\bar{k}(\partial_{\zeta_\beta} + \partial_\tau) - 2i\bar{k}\hat{L}_\beta \right] B_\beta(\zeta_\beta, \tau) \\ = & \sum_{\alpha \neq \beta} e^{i\phi_\alpha(Z, t)} \left[ -2(i(\partial_Z \phi_\alpha(Z, t))A_\alpha(Z, t) + \partial_Z A_\alpha(Z, t))(\beta(\widetilde{Z}) | \partial_Z | \alpha(Z)) \right. \\ & \left. - A_\alpha(Z, t) (\beta(\widetilde{Z}) | \partial_Z^2 | \alpha(Z)) \right] , \end{aligned} \quad (6.29)$$

mit einem zu (5.45) ähnlichen Operator

$$\begin{aligned} \hat{L}_\beta = \frac{i}{2\bar{k}} & \left[ R_\beta(Z, u_\beta(Z, t)) + \left( \frac{\bar{k}}{k_\beta(Z)} \right)^2 \partial_{\zeta_\beta}^2 \right. \\ & \left. + \left( \left( \partial_Z \frac{\bar{k}}{k_\beta(Z)} \right) - \frac{\bar{k} [\partial_{Z'} k_\beta + M\Gamma_\beta]_{u_\beta}^Z - 2\underline{\mathcal{D}}_{\beta\beta}^{(1)}(Z') k_\beta(Z')|_{Z'=u_\beta(Z,t)}}{k_\beta^2(Z)} \right) \partial_{\zeta_\beta} \right]. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Hier haben wir die wie folgt definierten Matrixdarstellungen  $\underline{\mathcal{D}}^{(1,2)}(Z)$  der ersten und zweiten Ortsableitung verwendet:

$$\underline{\mathcal{D}}^{(1)}(Z) := \left( (\widetilde{\beta(Z)} | \frac{\partial}{\partial Z} | \alpha(Z)) \right), \quad (6.31)$$

$$\underline{\mathcal{D}}^{(2)}(Z) := \left( (\widetilde{\beta(Z)} | \frac{\partial^2}{\partial Z^2} | \alpha(Z)) \right). \quad (6.32)$$

Desweiteren tritt in  $\hat{L}_\beta$  noch die Funktion

$$\begin{aligned} R_\beta(Z, u_\beta(Z, t)) = \underline{\mathcal{D}}_{\beta\beta}^{(2)}(Z) - \frac{\underline{\mathcal{D}}_{\beta\beta}^{(1)}(Z) [\mathcal{R}_\beta]_{u_\beta}^Z}{k_\beta(Z)} \\ + \frac{1}{2k_\beta^2(Z)} \left[ \left( \partial_Z k_\beta(Z) + \frac{1}{2} [\mathcal{R}_\beta]_{u_\beta}^Z \right) [\mathcal{R}_\beta]_{u_\beta}^Z - [k_\beta(\partial_{Z'} \mathcal{R}_\beta)]_{u_\beta}^Z \right] \end{aligned} \quad (6.33)$$

mit

$$\mathcal{R}_\beta(Z) := \partial_Z k_\beta(Z) + M\Gamma_\beta(Z) + 2\underline{\mathcal{D}}_{\beta\beta}^{(1)}(Z) k_\beta(Z) \quad (6.34)$$

auf. Beim Vergleich von  $R_\beta(Z, u_\beta(Z, t))$  mit seinem skalaren Analogon aus Gl. (5.43) erkennt man, dass hier neben den Beiträgen aus (5.43) weitere, zu den Diagonalelementen  $\underline{\mathcal{D}}_{\beta\beta}^{(1,2)}(Z)$  proportionale Terme auftreten, die erst durch die Verwendung eines matrixwertigen Potentials entstanden sind. Das gleiche gilt für den Vergleich der Koeffizienten von  $\partial_\zeta$  aus (5.45) und von  $\partial_{\zeta_\beta}$  aus (6.30).

Nach Übergang auf der rechten Seite von (6.29) zu  $B_\alpha(\zeta_\alpha(Z), \tau(t)) = A_\alpha(Z, t)$  und nach Umformung folgt schließlich

$$(\partial_{\zeta_\beta} + \partial_\tau) B_\beta(\zeta_\beta, \tau) = \sum_\alpha \hat{\underline{\mathcal{L}}}_{\beta\alpha} B_\alpha(\zeta_\alpha, \tau) \quad (6.35)$$

mit einem Matrixoperator  $\hat{\underline{\mathcal{L}}}$ , der die Komponenten

$$\begin{aligned} \hat{\underline{\mathcal{L}}}_{\beta\alpha} = \hat{L}_\beta \delta_{\beta\alpha} + (1 - \delta_{\beta\alpha}) e^{i(\phi_\alpha(Z,t) - \phi_\beta(Z,t))} \\ \times \frac{i}{2\bar{k}} \left[ 2\underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z) \left( i(\partial_Z \phi_\alpha(Z, t)) + \frac{\bar{k}}{k_\alpha(Z)} \partial_{\zeta_\alpha} \right) + \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(2)}(Z) \right] \end{aligned} \quad (6.36)$$

hat.

Wir sehen also, dass sich auch im Falle eines matrixwertigen Potentials eine Schrödinger-Gleichung vom Typ (4.26) aufstellen lässt. Wie zu erwarten, müssen wir nun einen matrixwertigen Differentialoperator  $\hat{\mathcal{L}}$  betrachten, der zu Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Komponenten-Wellenfunktionen führen wird. Die einzige, wesentliche Neuerung, die sich hier gegenüber dem eindimensionalen Fall ergab, war die Einführung des geometrischen Anteils (6.28) im Phasenwinkel (6.23).

Durch die klare Aufspaltung des Operators  $\hat{\mathcal{L}}$  in einen diagonalen und einen nichtdiagonalen Anteil kann man leicht den adiabatischen Grenzfall studieren, indem man den nichtdiagonalen Anteil vernachlässigt. In diesem Fall gilt für jede Komponenten-Wellenfunktion  $B_\beta(\zeta_\beta, \tau)$  eine eindimensionale Schrödinger-Gleichung vom Typ (4.26) mit dem Operator  $\hat{L}_\beta$  aus (6.30), die mit den bisher entwickelten Methoden gelöst werden kann.

## 6.2 Lösen der Schrödinger-Gleichung

Der einzige Unterschied der linken Seite von (6.35) zur linken Seite der Schrödinger-Gleichung in der Form (4.26) ist der zusätzliche Index  $\beta$ . Wir können also leicht die Greensche Funktion aus (4.28) auf den hier vorliegenden Fall übertragen und erhalten

$$G_\beta(\zeta_\beta, \tau) := \Theta(\zeta_\beta + \tau) \delta(\zeta_\beta - \tau) . \quad (6.37)$$

Damit können wir (6.35) in eine Integralgleichung umwandeln,

$$\begin{aligned} B_\beta(\zeta_\beta, \tau) = & \tilde{B}_{0,\beta}(\zeta_\beta - \tau) \\ & + \sum_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta'_\beta \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' G_\beta(\zeta_\beta - \zeta'_\beta, \tau - \tau') (\hat{\mathcal{L}}_{\beta\alpha} B_\alpha)(\zeta_\alpha(\mathcal{Z}_\beta(\zeta'_\beta)), \tau') . \end{aligned} \quad (6.38)$$

Hier erkennt man bereits ein wesentliches Merkmal des Matrixformalismus. Um die Integration über  $\zeta'_\beta$  einer Funktion durchzuführen, die von  $\zeta_\alpha$  abhängt, muss zunächst die implizite Abhängigkeit dieser Größen voneinander berücksichtigt werden. Alle  $\zeta_\alpha$  hängen von *einer* Ortskoordinate  $Z$  ab. Dieses  $Z$  kann aus jeder beliebigen Koordinate  $\zeta'_\beta$  über die entsprechende Umkehrfunktion  $\mathcal{Z}_\beta(\zeta)$  berechnet werden. Der Zusammenhang zwischen  $\zeta'_\beta$  und  $\zeta_\alpha$  ist also, wie im Integranden zu erkennen, über den Ausdruck  $\zeta_\alpha(\mathcal{Z}_\beta(\zeta'_\beta))$  gegeben.

Mit den Methoden aus Kapitel 4 erhält man also schließlich unter Verwendung der Green-

---



Funktion aus (6.37):

$$\begin{aligned}
 B_\beta(\zeta_\beta, \tau) &= \varphi_\beta(\zeta_\beta - \tau) + \sum_\alpha \int_{\zeta_\beta - \tau}^{\zeta_\beta} d\zeta'_\beta \left[ (\hat{\underline{L}}_{\beta\alpha} B_\alpha)(\zeta_\alpha(\mathcal{Z}_\beta(\zeta'_\beta)), \tau') \right]_{\tau' = \tau - \zeta_\beta + \zeta'_\beta} \\
 &=: \varphi_\beta(\zeta_\beta - \tau) + \sum_\alpha (\hat{\underline{K}}_{\beta\alpha} B_\alpha)(\zeta_\alpha(\mathcal{Z}_\beta(\zeta_\beta)), \tau) .
 \end{aligned} \tag{6.39}$$

Hierbei haben wir den neuen, matrixwertigen Integraloperator  $\hat{\underline{K}}$  definiert. Durch iteratives Einsetzen erhalten wir also

$$B_\beta(\zeta_\beta, \tau) = \sum_{n,\alpha} \left( (\hat{\underline{K}}^n)_{\beta\alpha} \varphi_\alpha \right) (\zeta_\alpha(\mathcal{Z}_\beta(\zeta_\beta)), \tau) \quad (\beta = 1, \dots, N) , \tag{6.40}$$

bzw. nach Übergang zur Amplitudenfunktion  $A_\beta(Z, t)$  in den alten Koordinaten

$$A_\beta(Z, t) = \sum_{n,\alpha} \left( (\hat{\underline{K}}^n)_{\beta\alpha} \varphi_\alpha \right) (Z, t) \quad (\beta = 1, \dots, N) . \tag{6.41}$$

Um die Verwendung von Umkehrfunktionen  $\mathcal{Z}_\beta(\zeta)$  weitestgehend zu vermeiden, ist es günstig, wieder zur eigentlichen Ortskoordinate  $Z$  zurückzukehren. Der Integraloperator  $\hat{\underline{K}}_{\beta\alpha}$  hat dann die Gestalt

$$(\hat{\underline{K}}_{\beta\alpha} \varphi_\alpha)(Z, t) = \int_{u_\beta(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_\beta(Z')} (\hat{\underline{L}}_{\beta\alpha} \varphi_\alpha)(Z', t') \Big|_{t' = t - M(\zeta_\beta(Z) - \zeta_\beta(Z'))/\bar{k}} \tag{6.42}$$

Wir wollen nun die nullte und die erste Ordnung formal berechnen, um einen Eindruck von der Gestalt der Lösung zu bekommen. Hierzu schreiben wir den Operator  $\hat{\underline{L}}$  aus (6.36) abstrakt in der Form

$$\hat{\underline{L}}_{\beta\alpha} = \underline{\mathcal{A}}_{\beta\alpha}(Z, t) + \underline{\mathcal{B}}_{\beta\alpha}(Z, t) \partial_{\zeta_\alpha} + \underline{\mathcal{C}}_{\beta\alpha}(Z) \partial_{\zeta_\alpha}^2 . \tag{6.43}$$

Die matrixwertigen Funktionen  $\underline{\mathcal{A}}(Z, t)$ ,  $\underline{\mathcal{B}}(Z, t)$  und  $\underline{\mathcal{C}}(Z, t)$ , die aus (6.36) unter Verwendung von (6.30) folgen, lauten

$$\begin{aligned}
 \underline{\mathcal{A}}_{\beta\alpha}(Z, t) &= \delta_{\beta\alpha} \frac{i}{2\bar{k}} R_\beta(Z, u(Z, t)) \\
 &+ (1 - \delta_{\beta\alpha}) e^{i(\phi_\alpha(Z, t) - \phi_\beta(Z, t))} \left[ \frac{i}{2\bar{k}} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(2)}(Z) - \frac{(\partial_Z \phi_\alpha(Z, t))}{\bar{k}} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z) \right] ,
 \end{aligned} \tag{6.44a}$$


---

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{B}}_{\beta\alpha}(Z, t) = & \delta_{\beta\alpha} \frac{i}{2\bar{k}} \left( \left( \partial_Z \frac{\bar{k}}{k_\beta(Z)} \right) - \frac{\bar{k} \llbracket k_\beta + m\Gamma_\beta \rrbracket_{u_\beta}^Z - 2\underline{\mathcal{D}}_{\beta\beta}^{(1)}(Z') k_\beta(Z') \big|_{Z'=u_\beta(Z, t)}}{k_\beta^2(Z)} \right) \\ & + (1 - \delta_{\beta\alpha}) e^{i(\phi_\alpha(Z, t) - \phi_\beta(Z, t))} \frac{i}{2k_\alpha(Z)} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z) , \end{aligned} \quad (6.44b)$$

$$\underline{\mathcal{C}}_{\beta\alpha}(Z) = \delta_{\beta\alpha} \frac{i}{2\bar{k}} \left( \frac{\bar{k}}{k_\beta(Z)} \right)^2 . \quad (6.44c)$$

Vergleichen wir dies mit den eindimensionalen Funktionen  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{C}$ , die in Gl. (5.45) definiert sind, so fällt auf, dass zwar  $\underline{\mathcal{C}}(Z)$  immer noch zeitunabhängig ist, aber die Funktionen  $\underline{\mathcal{A}}(Z, t)$  und  $\underline{\mathcal{B}}(Z, t)$  nicht mehr ausschließlich über die Untergrenzenfunktion  $u_\beta(Z, t)$  zeitabhängig sind. Durch den in den nichtdiagonalen Beiträgen enthaltenen Phasenfaktor

$$\underline{\mathcal{P}}_{\beta\alpha}(Z, t) := e^{i(\phi_\alpha(Z, t) - \phi_\beta(Z, t))} \quad (6.45)$$

verbleibt zumindest im Fall verschiedener Gesamtenergien der Zustände mit Index  $\alpha$  und  $\beta$  in den nichtdiagonalen Anteilen der Funktionen  $\underline{\mathcal{A}}(Z, t)$  und  $\underline{\mathcal{B}}(Z, t)$  eine weitere Zeitabhängigkeit in Form einer dynamischen Phase, die gerade der Differenz der beteiligten Gesamtenergien entspricht.

Berechnen wir nun die nullte und die erste Ordnung der Entwicklung der Wellenfunktion. In nullter Ordnung  $\hat{\underline{K}}$  erhalten wir gerade den vollkommen adiabatischen Grenzfall

$$A_\beta^{(0)}(Z, t) = \varphi_\beta(\zeta_\beta(Z) - \tau(t)) \implies \Psi_\beta(Z, t) = e^{i\phi_\beta(Z, t)} \varphi_\beta(\zeta_\beta(Z) - \tau(t)) , \quad (6.46)$$

Hier erkennt man, dass im atomaren Gesamtzustand (6.6),

$$|\Psi(Z, t)\rangle = \sum_\alpha \Psi_\alpha(Z, t) |\alpha(Z)\rangle ,$$

jeder lokale, innere, atomare Zustand  $|\alpha(Z)\rangle$  ein unabhängiges Wellenpaket mit sich führt, dass der nullten Ordnung der Entwicklung im eindimensionalen Fall entspricht. Jedes dieser Wellenpakete bewegt sich somit dispersionsfrei mit der klassischen Schwerpunktschwindigkeit durch das Potential  $\Delta V_\alpha(Z)$ , das vom Realteil der lokalen Eigenenergie seines zugehörigen Eigenzustands  $|\alpha(Z)\rangle$  der Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}(Z)$  abhängt (siehe Gl. (6.15)).

Mit der Lösung (6.46) ist man also bereits in der Lage, adiabatische IABSE-Experimente zu beschreiben, unterliegt dann aber auch den gleichen Näherungen und Beschränkungen, wie bei der Lösung der skalaren Schrödinger-Gleichung, die wir in den vergangenen Kapiteln untersucht haben.

Der wesentliche Unterschied zu dem bereits in Abschnitt 3.3 durch einfache Überlegungen eingeführten atomaren Gesamtzustand (3.85) ist, dass hier der geometrische Anteil des Phasenfaktors bereits automatisch enthalten ist.

Nun wollen wir zur Berechnung der ersten Ordnung kommen. Hier erhalten wir

$$\begin{aligned}
A_{\beta}^{(1)}(Z, t) &= \varphi_{\beta}(\zeta_{\beta}(Z) - \tau(t)) \\
&+ \sum_{\alpha} \int_{u_{\beta}(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\beta}(Z')} \mathcal{A}_{\beta\alpha}(Z', t - M(\zeta_{\beta}(Z) - \zeta_{\beta}(Z'))/\bar{k}) \\
&\quad \times \varphi_{\alpha}(\zeta_{\alpha}(Z') - \tau(t) + \zeta_{\beta}(Z) - \zeta_{\beta}(Z')) \\
&+ \sum_{\alpha} \int_{u_{\beta}(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\beta}(Z')} \mathcal{B}_{\beta\alpha}(Z', t - M(\zeta_{\beta}(Z) - \zeta_{\beta}(Z'))/\bar{k}) \\
&\quad \times \varphi'_{\alpha}(\zeta_{\alpha}(Z') - \tau(t) + \zeta_{\beta}(Z) - \zeta_{\beta}(Z')) \\
&+ \sum_{\alpha} \int_{u_{\beta}(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\beta}(Z')} \mathcal{C}_{\beta\alpha}(Z') \\
&\quad \times \varphi''_{\alpha}(\zeta_{\alpha}(Z') - \tau(t) + \zeta_{\beta}(Z) - \zeta_{\beta}(Z')) .
\end{aligned} \tag{6.47}$$

Hier sind nach wie vor die Ableitungen der Anfangswellenpakete  $\varphi_{\alpha}(\zeta)$  stets mit einem Strich gekennzeichnet, d.h. es ist

$$\varphi'_{\alpha}(\zeta) \equiv \partial_{\zeta} \varphi_{\alpha}(\zeta) , \quad \varphi''_{\alpha}(\zeta) \equiv \partial_{\zeta}^2 \varphi_{\alpha}(\zeta) , \quad \varphi_{\alpha}^{(i)}(\zeta) \equiv \partial_{\zeta}^i \varphi_{\alpha}(\zeta) , \quad (i \geq 3) . \tag{6.48}$$

Im Gegensatz dazu notieren wir die Amplitudenfunktionen  $A_{\alpha}(Z, t)$  bzw.  $B_{\alpha}(\zeta_{\alpha}, \tau)$ , die bis zur  $n$ -ten Ordnung entwickelt wurden, mit  $A_{\alpha}^{(n)}(Z, t)$  bzw.  $B_{\alpha}^{(n)}(\zeta_{\alpha}, \tau)$ , was nicht mit der  $n$ -ten Ableitung zu verwechseln ist!

Kommen wir nun zur Interpretation der ersten Ordnung (6.47), d.h. wir wollen die Korrekturbeiträge nun im Einzelnen verstehen. Dazu beginnen wir mit einer Betrachtung der Argumente der Funktionen in den Integranden. Wir definieren

$$\Delta T_{\beta}(Z', Z) := \frac{M}{\bar{k}} (\zeta_{\beta}(Z) - \zeta_{\beta}(Z')) , \tag{6.49}$$

was der Zeit entspricht, die ein klassisches Teilchen im Potential  $V_{\beta}(Z)$  benötigt, um die Strecke zwischen den Orten  $Z'$  und  $Z$  zurückzulegen. Weiter machen wir uns klar, dass  $\varphi_{\alpha}(\zeta_{\alpha}(Z) - \tau(t)) = A_{\alpha}^{(0)}(Z, t)$  der nullten Ordnung der Amplitudenfunktion mit Index  $\alpha$  entspricht.

Die erste Ordnung (6.47) kann damit geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
A_{\beta}^{(1)}(Z, t) &= A_{\beta}^{(0)}(Z, t) \\
&+ \sum_{\alpha} \int_{u_{\beta}(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\beta}(Z')} \mathcal{A}_{\beta\alpha}(Z', t - \Delta T_{\beta}(Z', Z)) \\
&\quad \times A_{\alpha}^{(0)}(Z', t - \Delta T_{\beta}(Z', Z)) \\
&+ \sum_{\alpha} \int_{u_{\beta}(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\beta}(Z')} \mathcal{B}_{\beta\alpha}(Z', t - \Delta T_{\beta}(Z', Z)) \\
&\quad \times (\partial_{\zeta_{\alpha}} A_{\alpha}^{(0)})(Z', t - \Delta T_{\beta}(Z', Z)) \\
&+ \sum_{\alpha} \int_{u_{\beta}(Z, t)}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\beta}(Z')} \mathcal{C}_{\beta\alpha}(Z') \\
&\quad \times (\partial_{\zeta_{\alpha}}^2 A_{\alpha}^{(0)})(Z', t - \Delta T_{\beta}(Z', Z)) .
\end{aligned} \tag{6.50}$$

Die Korrekturen zum Anfangswellenpaket  $A_{\beta}^{(0)}(Z, t)$  am Punkt  $(Z, t)$  stammen also von den Anfangswellenpaketen aller Komponenten  $\alpha$  am Ort  $Z' < Z$ , zu einer früheren Zeit  $t - \Delta T_{\beta}(Z', Z)$ . Es gilt aber z.B. gerade  $A_{\beta}^{(0)}(Z, t) \equiv A_{\beta}^{(0)}(Z', t - \Delta T_{\beta}(Z', Z))$ , d.h. insbesondere die Selbstkorrekturbeiträge hängen alle nur von der betrachteten Stelle des ungestörten Anfangswellenpakets ab. Bei den diagonalen Korrekturtermen können wir also die Funktion  $A_{\beta}^{(0)}(Z, t)$  und deren Ableitungen aus dem Integral herausziehen und erhalten letztendlich die gleiche Entwicklung wie im eindimensionalen Fall. Zusätzlich müssen natürlich noch nichtdiagonale Beiträge berücksichtigt werden. Bei Wellenpaketen mit  $\alpha \neq \beta$  tragen - je nach Potentialverlauf - auch andere Stellen der Amplituden in nullter Ordnung zur Korrektur von  $A_{\beta}^{(0)}(Z, t)$  bei. Hier ist eine weitere Vereinfachung wie bei den diagonalen Termen nicht mehr möglich.

Insgesamt sieht man an der Formel (6.50) sehr schön, wie die Amplitudenfunktionen aller inneren atomaren Zustände sich gegenseitig beeinflussen. Tritt z.B. eine Komponente im Anfangszustand überhaupt nicht auf, d.h. ist z.B.  $A_{\beta}^{(0)}(Z, t) \equiv 0$ , so gehen einerseits von dieser Komponente (in erster Ordnung) keine Korrekturen aus, andererseits kann durch den Einfluss anderer Komponenten eine von Null verschiedene Amplitudenfunktion in dieser Komponente entstehen. All diese Effekte sind erst durch Einführung eines Matrixpotentials entstanden, womit wir nun die Beschränkung auf adiabatische Zustandsänderungen überwunden haben.

Der Hauptbeitrag der diagonalen (Selbst-)Korrekturen stammt aus der Funktion  $\mathcal{C}(Z)$ . Dies war bereits bei den skalaren Potentialen der Fall und zeigt, dass auch hier die Dispersion den größten Effekt bei der Korrektur ausmacht. Hier kommt wieder die Anwendung des in Abschnitt 4.3.5 erläuterten Verfahrens in Frage, bei dem sehr breite Wellenpake-

---

te zu einem sehr schmalen Wellenpaket superponiert werden. Für jedes Basiswellenpaket wird die Lösung in erster Ordnung berechnet, wobei der Dispersionsterm  $\mathcal{C}(Z)$ , der vor der zweiten Ableitung des Wellenpakets steht, bei ausreichender Breite der Basiswellenpakete vernachlässigbar wird. Ebenso kann man auch die Vernachlässigung des Korrekturbeitrags  $\mathcal{B}(Z, t)$  in Betracht ziehen, falls bereits die erste Ableitung der Einhüllenden relativ zur Einhüllenden selbst vernachlässigbar ist. In diesem Fall würde man lediglich den Korrekturbeitrag  $\mathcal{A}(Z, t)$  berücksichtigen, in dessen nichtdiagonalen Beiträgen die (nichtdiagonalen) Matrixelemente der Ableitungsmatrizen  $\mathcal{D}^{(1,2)}(Z)$  auftreten, die für die nichtadiabatische Mischung der Zustände und somit auch der Wellenpakete verantwortlich sind. Diese Matrizen können z.B. störungstheoretisch berechnet werden, siehe dazu die Anhänge A.3 und A.4 sowie die Gln. (A.92) und (A.93), aber in der Praxis wird man sie in der Regel numerisch als Differenzenquotienten berechnen.

Insgesamt wird bereits die numerische Berechnung der ersten Ordnung sehr anspruchsvoll werden, da sehr viele Zutaten in die Formel eingehen, über die dann letztendlich noch integriert werden muss. Selbst bei Verwendung der Methode aus Abschnitt 4.3.5 hat man trotz der Vernachlässigung einiger Korrekturbeiträge in der ersten Ordnung durch die anschließende Superposition der Wellenpakete einen großen Rechenaufwand.

Aus Zeitgründen konnte bisher kein numerisches Beispiel zur Anwendung der ersten Ordnung des Formalismus gerechnet werden. Dies wird aber in naher Zukunft nachgeholt, wenn an anderer Stelle P-erhaltende und P-verletzende Rotationen der Polarisierung von Atomen in elektrischen Feldern untersucht werden. Mehr dazu im Ausblick, siehe Abschnitt 8.2.

Wir wollen diesen Abschnitt mit einer Anmerkung zur Berechnung der zweiten Ordnung der Entwicklung abschließen. In der Definition des Operators  $\hat{\mathcal{L}}$  aus Gl. (6.43) stehen Ableitungen nach den Koordinaten  $\zeta_\alpha$ . In erster Ordnung macht dies Sinn, da der Operator dann nur auf die Einhüllenden  $\varphi_\alpha(\zeta_\alpha - \tau)$  wirkt. In zweiter Ordnung allerdings wirkt  $\hat{\mathcal{L}}$  auf  $(\hat{\mathcal{K}}\varphi_\alpha)(Z, t)$ , was eine gemischte Funktion von  $Z$  und allen  $\zeta_\beta(Z)$  ( $\beta = 1, \dots, N$ ) ist. Hier bietet es sich an, die Ableitungen nach  $\zeta_\alpha$  in  $\hat{\mathcal{L}}$  wieder in Ableitungen nach  $Z$  zu transformieren.

Man hat dann

$$\partial_{\zeta_\alpha} = \frac{k_\alpha(Z)}{\bar{k}} \partial_Z, \quad \partial_{\zeta_\alpha}^2 = \frac{k_\alpha(Z)(\partial_Z k_\alpha(Z))}{\bar{k}^2} \partial_Z + \left( \frac{k_\alpha(Z)}{\bar{k}} \right)^2 \partial_Z^2 \quad (6.51)$$

in Gl. (6.43) einzusetzen und erhält

$$\hat{\mathcal{L}}_{\beta\alpha} = \mathcal{A}_{\beta\alpha}(Z, t) + \mathcal{B}_{\beta\alpha}(Z, t) \partial_Z + \mathcal{C}_{\beta\alpha}(Z) \partial_Z^2 \quad (6.52)$$

mit den neuen Funktionen

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{B}}_{\beta\alpha}(Z, t) &= \mathcal{B}_{\beta\alpha}(Z, t) \frac{k_\alpha(Z)}{\bar{k}} + \mathcal{C}_{\beta\alpha}(Z) \frac{k_\alpha(Z)(\partial_Z k_\alpha(Z))}{\bar{k}^2} \\
 &= \delta_{\beta\alpha} \frac{i}{2\bar{k}} \left( k_\alpha(Z) \left( \partial_Z \frac{1}{k_\beta(Z)} \right) + \frac{k_\alpha(Z)(\partial_Z k_\alpha(Z))}{k_\beta^2(Z)} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{k_\alpha(Z) \llbracket k_\beta + m\Gamma_\beta \rrbracket_{u_\beta}^Z}{k_\beta^2(Z)} + \frac{2k_\alpha(Z) \left[ \mathcal{D}_{\beta\beta}^{(1)}(Z') k_\beta(Z') \right]_{Z'=u_\beta(Z, t)}}{\bar{k} k_\beta^2(Z)} \right) \\
 &\quad + (1 - \delta_{\beta\alpha}) e^{i(\phi_\alpha(Z, t) - \phi_\beta(Z, t))} \frac{i}{2\bar{k}} \mathcal{D}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z) ,
 \end{aligned} \tag{6.53}$$

und

$$\tilde{\mathcal{C}}_{\beta\alpha}(Z) = \mathcal{C}_{\beta\alpha}(Z) \left( \frac{k_\alpha(Z)}{\bar{k}} \right)^2 = \delta_{\beta\alpha} \frac{i}{2\bar{k}} \left( \frac{k_\alpha(Z)}{k_\beta(Z)} \right)^2 . \tag{6.54}$$

Hier haben wir die Funktionen  $\mathcal{B}_{\beta\alpha}(Z)$  und  $\mathcal{C}_{\beta\alpha}(Z)$  aus (6.44b) und (6.44c) verwendet. Die Funktion  $\mathcal{A}(Z, t)$  in  $\hat{\mathcal{L}}$  kann unverändert von (6.44a) übernommen werden.

## 6.3 Das Rezept zur theoretischen Beschreibung eines IABSE-Experiments

In diesem Abschnitt wollen wir die Vorgehensweise zur theoretischen Beschreibung eines allgemeinen IABSE-Experiments angeben und evtl. noch benötigte Werkzeuge bereitstellen.

Der prinzipielle Ablauf ist der Folgende. Zunächst wählt man die Anfangsbedingungen, die wir im nächsten Abschnitt genauer betrachten wollen. Dann berechnet man für verschiedene Feldkonfigurationen den (erweiterten) Fahrplan und schließlich für eine gegebene Feldkonfiguration das mit dem Experiment vergleichbare Spinecho-Signal.

Das erweiterte Fahrplanmodell werden wir in Abschnitt 6.3.2 diskutieren und die Vorgehensweise zur Berechnung des IABSE-Signals in Abschnitt 6.3.3 angeben.

### 6.3.1 Implementierung der Anfangsbedingungen

Es bietet sich, allein schon aufgrund der leichteren Wahl der normierten Einhüllenden  $\varphi(\zeta)$  (siehe die Diskussion vor Gl. (5.29), S. 93 im Abschnitt 5.2.2) wieder an, den Ort  $Z_0$  vor allen Feldern zu wählen.

Als nächstes muss man den inneren Anfangszustand des Atoms festlegen, z.B. anhand einer vorgegebenen Polarisation. Da man meistens eine Polarisation in eine eindeutige Raumrichtung wählt, kann man den entsprechenden Drehimpulsoperator  $\underline{F}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) in der Darstellung der Gesamtdrehimpulsbasis  $|j\rangle$  berechnen, die wir auch für die Darstellung der Massenmatrizen in Anhang B verwendet haben.

Nun kann man den Polarisationszustand mit vorgegebener Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $F$  und der Komponente  $F_i$  in *eine* bestimmte Raumrichtung  $i = 1, 2, 3$  durch Lösen des Eigenwertproblems

$$\begin{aligned} \underline{F}_i|\chi\rangle &= \underline{F}_i \sum_j \chi_j |j\rangle \stackrel{!}{=} F_i \sum_j \chi_j |j\rangle, \\ \underline{F}^2|\chi\rangle &= (\underline{F}_1^2 + \underline{F}_2^2 + \underline{F}_3^2)|\chi\rangle = F(F+1)|\chi\rangle \end{aligned} \quad (6.55)$$

festlegen. Im allgemeinen brauchen wir die Koeffizienten  $\chi_j$  bzgl. der Basis der lokalen atomaren Eigenzustände  $|\alpha(Z_0)\rangle$  am Anfangsort  $Z_0$ . Diese bekommen wir durch Projektion auf den zugeordneten linken Eigenzustand  $\langle\alpha(\widetilde{Z}_0)|$ ,

$$\hat{\chi}_\alpha = \langle\alpha(\widetilde{Z}_0)|\chi\rangle. \quad (6.56)$$

Der gesamte Polarisationszustand kann dann in der lokalen Basis angegeben werden als

$$\begin{aligned} |\chi\rangle &= \mathbb{1}|\chi\rangle = \sum_\alpha \mathbb{P}_\alpha(Z_0)|\chi\rangle = \sum_{\alpha,j} \chi_j \mathbb{P}_\alpha(Z_0)|j\rangle = \sum_{\alpha,j} \chi_j |\alpha(Z_0)\rangle \langle\alpha(\widetilde{Z}_0)|j\rangle \\ &\stackrel{!}{=} \sum_\alpha \hat{\chi}_\alpha |\alpha(Z_0)\rangle, \end{aligned} \quad (6.57)$$

wobei wir die Vollständigkeitsrelation (A.21d) und die Quasiprojektoren (A.21a) aus Anhang A.2 verwendet haben.

Nun betrachten wir den gesamten atomaren Zustand zur Zeit  $t = 0$ , bei der der Integraloperator  $\hat{\mathcal{K}}$  (6.42) verschwindet und die Wellenpakete der nullten Ordnung der Entwicklung entsprechen, also gleich  $\varphi_\alpha(\zeta_\alpha(Z))$  sind. Zusammen mit der Definition (6.6) des atomaren Gesamtzustands folgt dann

$$|\Psi(Z, t=0)\rangle = \sum_\alpha \Psi_\alpha(Z, t=0) |\alpha(Z)\rangle = \sum_\alpha e^{i\phi_\alpha(Z, t=0)} \varphi_\alpha(\zeta_\alpha(Z)) |\alpha(Z)\rangle \quad (6.58)$$

mit dem Anfangsphasenwinkel nach Gl. (6.23),

$$\phi_\alpha(Z, t=0) = S_\alpha(Z) = \int_{Z_0}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_\alpha(Z')}. \quad (6.59)$$

Die Anfangswellenpakete  $\varphi_\alpha(\zeta)$  sind festgelegt durch die Wahl der Einhüllenden  $\varphi(\zeta)$  und der Koeffizienten  $\hat{\chi}_\alpha$  des Anfangszustands des Atoms. Wählen wir für alle Komponenten eine identische Einhüllende, so erhalten wir insgesamt

$$\varphi_\alpha(\zeta) = \hat{\chi}_\alpha \varphi(\zeta) . \quad (6.60)$$

Dass dies durchaus sinnvoll ist, haben wir bereits in Abschnitt 3.3.1 diskutiert, denn zur Zeit  $t = 0$  wählen wir den Anfangszustand des Atoms ja nach Gl. (3.57) in der Form

$$|\Psi(Z, t = 0)\rangle = \Psi(Z, 0)|\chi\rangle = e^{i\phi(Z, 0)}\varphi(Z - Z_0)|\chi\rangle , \quad (6.61)$$

wobei wir hier wieder davon ausgegangen sind, dass wir wie in Gl. (5.29)  $Z_0$  und die Breite  $\sigma$  des Anfangswellenpakets so wählen, dass

$$\zeta_\alpha(Z) \approx Z - Z_0 \quad \text{für} \quad \varphi(\zeta_\alpha(Z)) \neq 0 \quad (6.62)$$

erfüllt ist.

### 6.3.2 Das erweiterte Fahrplanmodell

Das in Abschnitt 3.3.3 beschriebene Fahrplanmodell gibt die Bewegung der Schwerpunkte der einzelnen Wellenpakete nur im adiabatischen Grenzfall richtig wieder. Wir haben gesehen, dass diese Bewegung dann völlig identisch mit der Bewegung klassischer Punktteilchens in unterschiedlichen Potentialen  $V_\alpha(Z)$  ist.

Nun wollen wir das Fahrplanmodell dahingehend erweitern, dass auch die Bewegung neu erzeugter Wellenpakete dargestellt werden kann, was aber zu grundsätzlichen Schwierigkeiten führt. Mit dem in diesem Kapitel aufgestellten Formalismus ist die Schwerpunktbewegung neu erzeugter Wellenpakete nicht direkt ablesbar. Wir wissen zunächst weder, wo dieser Schwerpunkt liegt, noch, wie das neue Wellenpaket überhaupt aussieht. Erst eine numerische Berechnung der höheren Ordnung der Entwicklung könnte diese Informationen liefern. Den Schwerpunkt könnte man dann als zeitabhängigen Ortserwartungswert des neuen Wellenpakets numerisch berechnen und die Breite des Wellenpakets aus der Varianz erhalten. Diese Rechnung wäre aber für das Aufstellen des Fahrplans viel zu aufwändig, denn der Fahrplan soll ja gerade eine Orientierungshilfe sein, die man vor der Berechnung der atomaren Gesamtwellenfunktion braucht. Der Fahrplan ist (in unseren Augen) einzig dazu gedacht, einen groben Überblick über ein evtl. zu machendes Experiment zu liefern. Aus dem Fahrplan soll letztendlich die Entscheidung für die Feldkonfiguration und den verwendeten Anfangszustand des Atoms fallen.

Wie können wir also mit einfachen Mitteln einen erweiterten Fahrplan erstellen, der die Bewegung neuer Wellenpakete zumindest in grober Näherung visualisiert? Die Antwort auf diese Frage ist praktisch schon im zweiten Satz dieses Abschnitts gegeben: Wir müssen uns zunächst von den Wellenpaketen lösen und uns ganz auf den klassischen Standpunkt

---



stellen, d.h. von punktförmigen Teilchen sprechen. Dann kann man sich vorstellen, dass sich ein Teilchen der „Sorte“  $\alpha$  an einem Ort  $Z$  im Potential in ein Teilchen der Sorte  $\beta$  verwandelt, wobei aufgrund des zeitunabhängigen Potentials die Gesamtenergie erhalten ist.

Man kann sich auch mathematisch davon überzeugen, dass dies unter gewissen Voraussetzungen für die Schwerpunkte der Wellenpakete erfüllt ist, indem man z.B. ein einfaches Zwei-Zustands-System betrachtet und die erste Ordnung der Entwicklung auf ebene WKB-Wellen anwendet. Superponiert man anschließend diese ebenen Wellen unter geschickter Anwendung einiger Näherungen zu Wellenpaketen, erhält man hinter allen Potentialen eine Energieerhaltungsgleichung für den Schwerpunkt des im Potential erzeugten Wellenpakets, die die Gesamtenergie des ursprünglichen Wellenpakets enthält. Wir wollen diese lange und sehr technische Rechnung hier nicht vorführen, sondern uns mit der im letzten Absatz dargestellten, klassischen Sichtweise begnügen. Wir werden ohnehin feststellen, dass das erweiterte Fahrplanmodell nur sehr eingeschränkt in der Lage ist, die physikalischen Vorgänge darzustellen.

Im einfachen Fahrplanmodell braucht ein Teilchen im Zustand  $|\alpha(Z)\rangle$  die Zeit

$$T_\alpha(Z) = \frac{M}{\bar{k}} \zeta_\alpha(Z) = \int_{Z_0}^Z dZ' \frac{M}{k_\alpha(Z')} \quad (6.63)$$

um vom Ort  $Z_0$  zum Ort  $Z$  unter dem Einfluss des Potentials  $V_\alpha(Z)$  zu gelangen (vergleiche Gl. (3.81) auf Seite 44). Dieses Potential geht in der lokalen Wellenzahl gemäß (6.14) ein,

$$k_\alpha(Z) = \sqrt{\bar{k}_\alpha^2 - 2MV_\alpha(Z)} \ , \quad (6.64)$$

wobei nach Gl. (6.16)

$$\bar{k}_\alpha^2 = 2ME_\alpha^{\text{ges}} = \bar{k}^2 + V_\alpha(Z_0) \quad (6.65)$$

die von der Gesamtenergie des Zustands  $|\alpha(Z_0)\rangle$  am Ort  $Z_0$  abhängige, totale Wellenzahl ist.

Geht nun das Teilchen im Zustand  $|\alpha(Z)\rangle$  im stationären Potential  $V_\alpha(Z)$  an der Stelle  $Z$  in den Zustand  $|\beta(Z)\rangle$  über, so wird sich seine Gesamtenergie nicht verändern. Das lokale Potential, das das Teilchen im Zustand  $|\beta(Z)\rangle$  aber spürt, ist  $V_\beta(Z)$ , somit wird sich seine lokale Wellenzahl ändern zu

$$k_{\alpha \rightarrow \beta}(Z) := \sqrt{\bar{k}_\alpha^2 - 2MV_\beta(Z)} = \sqrt{\bar{k}^2 - 2M(V_\beta(Z) - V_\alpha(Z_0))} \ . \quad (6.66)$$

Hieraus folgt, dass selbst im feldfreien Raum, wo  $V_\beta(Z) \rightarrow V_\beta(Z_0)$  ist, bei nichtentarteten Zuständen  $|\alpha(Z_0)\rangle$  und  $|\beta(Z_0)\rangle$  die freie Wellenzahl des übergegangenen Teilchens von der freien Wellenzahl  $\bar{k}$  abweicht und somit auch seine freie (mittlere) Geschwindigkeit.

Ist das Teilchen am Ort  $Z_0$  gestartet, am Ort  $Z_1$  vom Zustand  $|\alpha(Z_1)\rangle$  in den Zustand  $|\beta(Z_1)\rangle$  übergegangen und befindet sich nun am Ort  $Z > Z_1$ , so hat es die Gesamtzeit

$$T_{\alpha \rightarrow \beta}(T_\alpha(Z_1), Z) := T_\alpha(Z_1) + \int_{Z_1}^Z dZ' \frac{M}{k_{\alpha \rightarrow \beta}(Z')} \quad (6.67)$$

benötigt. Wir können dies nach Multiplikation mit  $\bar{v}$  auch wieder mit den Koordinaten  $\zeta_\alpha(Z)$  schreiben und erhalten

$$\zeta_{\alpha \rightarrow \beta}(\zeta_\alpha(Z_1), Z) := \zeta_\alpha(Z_1) + \int_{Z_1}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\alpha \rightarrow \beta}(Z')} . \quad (6.68)$$

Man kann sich leicht denken, dass bei mehrfachen, aufeinanderfolgenden Übergängen, die Ausdrücke auf analoge Weise erweitert werden und an Komplexität gewinnen werden. Eine übersichtliche und gleichzeitig informative Notation zu finden ist nicht einfach. Wir wollen den Wert für  $\zeta$  am Ort  $Z$  eines Teilchens, das am Ort  $Z_{\beta \rightarrow \gamma}$  bei einem Wert  $\zeta_{\alpha \rightarrow \beta}$  vom Zustand  $|\beta(Z_{\beta \rightarrow \gamma})\rangle$  in den Zustand  $|\gamma(Z_{\beta \rightarrow \gamma})\rangle$  übergegangen ist und insgesamt aus einem Anfangszustand  $|\alpha(Z_0)\rangle$  entstanden ist, bezeichnen als

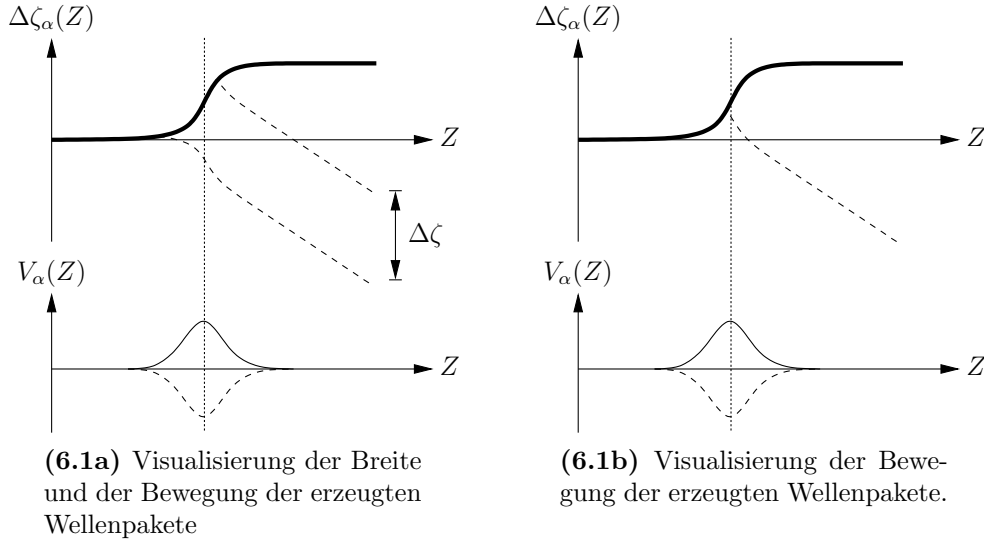
$$\zeta_{\alpha \rightarrow \gamma}(\zeta_{\alpha \rightarrow \beta}, Z_{\beta \rightarrow \gamma}, Z) = \zeta_{\alpha \rightarrow \beta} + \int_{Z_{\beta \rightarrow \gamma}}^Z dZ' \frac{\bar{k}}{k_{\alpha \rightarrow \gamma}(Z')} . \quad (6.69)$$

Es handelt sich dabei um eine rekursive Definition, da  $\zeta_{\alpha \rightarrow \beta}$  selbst aus mehrfachen aufeinanderfolgenden Übergängen aus dem Zustand  $|\alpha(Z_0)\rangle$  entstanden sein kann. Die Verwendung von Gl. (6.69) erlaubt die Beschreibung der Position des Teilchens relativ zur Position eines freien Teilchen gemäß

$$\Delta \zeta_{\alpha \rightarrow \gamma}(\zeta_{\alpha \rightarrow \beta}, Z_{\beta \rightarrow \gamma}, Z) := \zeta_{\alpha \rightarrow \gamma}(\zeta_{\alpha \rightarrow \beta}, Z_{\beta \rightarrow \gamma}, Z) - (Z - Z_0) . \quad (6.70)$$

Nachdem wir uns bisher Gedanken über Teilchenpositionen gemacht haben, sollten wir uns nun überlegen, wie wir die obigen Gleichungen im Hinblick auf die Bewegung von Wellenpaketen interpretieren. Das grundlegende Problem, nämlich die Unkenntnis über die Form des neuen Wellenpakets und die Lage dessen Schwerpunkts, verhindert die genaue Kenntnis des Ortes  $Z_{\alpha \rightarrow \beta}$  innerhalb eines Potentials, an dem wir den Übergang ansetzen sollen.

In Abb. 6.1a ist eine Möglichkeit der Darstellung des erweiterten Fahrplans schematisch gezeigt. Hier betrachten wir zwei Zustände (durchgezogene und gestrichelte Linien), die entgegengesetzten Potentials (z.B. erzeugt durch ein magnetisches Feld) unterliegen. Anfangs starten wir mit einem einzigen Zustand. Die Bewegung des Schwerpunkts des zugeordneten Wellenpakets im Potential ist durch die durchgezogene Linie im oberen Teil



**Abbildung 6.1:** Zwei Beispiele zur Anwendung des erweiterten Fahrplanmodells.

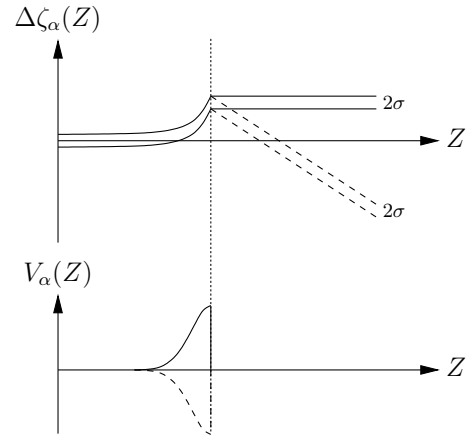
der Abbildung eingezeichnet. Die Dicke der Linie soll in etwa die Breite bzw. die Unschärfe des Wellenpakets repräsentieren. Trifft das Wellenpaket nun auf das Potential, beginnt die Produktion des Wellenpakets des zweiten Zustands, dargestellt durch die erste gestrichelte Linie in der oberen Abbildung. Zum einen ist die Geschwindigkeit (Steigung) dieser „Vorderkante“ im potentialfreien Raum von der eines freien Wellenpakets verschieden, zum anderen sieht man auch die Auswirkungen des zugehörigen Potentials auf den Verlauf der gestrichelten Linie. Die Produktion des neuen Wellenpakets hört erst auf, wenn das erste Wellenpaket das Potential vollständig verlassen hat. Die zweite gestrichelte Linie symbolisiert somit die hintere Kante des neuen Wellenpakets.

Durch die in Abb. 6.1a verwendete Darstellung bekommt man einen Eindruck von der Breite (die in der Abbildung mit  $\Delta\zeta$  bezeichnet wurde) des neuen Wellenpakets, die sowohl von der Breite des erzeugenden Wellenpakets als auch von der Breite des Potentials und der Differenz der Geschwindigkeit zum freien Wellenpaket bestimmt wird. Der Nachteil dieser Art der Darstellung ist die Unübersichtlichkeit, die zwangsläufig bei der Visualisierung mehrerer Übergänge entsteht. In Abb. 6.1b ist nur eine mittlere Linie für das neue Wellenpaket eingezeichnet, die man dann als Schwerpunkt bezeichnen kann<sup>2</sup>. Den Vorteil der größeren Übersichtlichkeit in Abb. 6.1b erkauft man sich allerdings durch das Verwerfen der Information über die Breite der neuen Wellenpakete.

<sup>2</sup>Die tatsächliche Lage des Schwerpunkts des neuen Wellenpakets ist wie in der Einleitung zu diesem Abschnitt bereits erklärt nicht bekannt. Man kann aber erwarten, dass auch das neu erzeugte Wellenpaket in nullter Näherung als dispersionsfreies Wellenpaket beschrieben werden kann, so dass in diesem speziellen Fall jeder Punkt des Wellenpakets als Bezugspunkt angesehen werden kann.

Man kann sich vorstellen, dass aus Kreuzungspunkten mit neu entstandenen Wellenpaketen aufgrund der (bei ungünstig gewählten Potentialen) sehr großen Breite der Wellenpakete ganze Kreuzungsflächen werden. Bei stark ausgeschmierten neuen Wellenpaketen kann kein ausgeprägtes Spinechosignal mehr gemessen werden.

Um ein scharfes Spinechosignal zu erhalten, muss man die Potentiale also derart wählen, dass die Breite des erzeugenden Wellenpakets erhalten bleibt. In Abb. 6.2 ist der effektivste Weg gezeigt, dies zu erreichen, nämlich die Verwendung eines zunächst adiabatischen Potentials, das dann einen plötzlichen Sprung hat. Nur an der Potentialstufe wird das neue Wellenpaket erzeugt. Die Breite  $2\sigma$  des ursprünglichen Wellenpakets, die durch den Abstand der durchgezogenen Linie symbolisiert ist, bleibt so beim neuen Wellenpaket direkt erhalten. In der Praxis könnte man eine leicht aufgeweichte Kante verwenden, um das in erster Ordnung entstehende Wellenpaket numerisch zu berechnen.



**Abbildung 6.2:** Ein drittes Beispiel zur Anwendung des erweiterten Fahrplanmodells.

Wir fassen die Anleitung zum Erstellen des erweiterten Fahrplans zusammen:

- (1) Zunächst entscheidet man, welche Zustände im Anfangszustand enthalten sein sollen.
- (2) Dann wählt man die äußeren elektrischen und magnetischen Felder und berechnet damit für das betrachtete Atom die Potentialverläufe für alle inneren atomaren Zustände.
- (3) Man beginnt dann mit der Erstellung des einfachen Fahrplans wie in Kap. 3.3.3 beschrieben.
- (4) Nun hat man sich für eine der oberen Betrachtungsweisen des erweiterten Fahrplanmodells zu entscheiden. Alternativ dazu kann man natürlich auch eine gemischte Darstellung verwenden.

Es empfiehlt sich hier, ein adiabatisches Potential mit wenigen Sprüngen zu verwenden und die Darstellung aus Abb. 6.2 zu verwenden. Auf diese Weise wird die Übersichtlichkeit des Fahrplans nicht gefährdet und man bekommt keine allzu breiten Wellenpakete.

- (5) Man muss sich auch anhand der Massenmatrix  $\mathcal{M}(Z)$  überlegen, welche Mischungen am stärksten auftreten und dann nur diese berücksichtigen.

Als Resultat ergeben sich die Kreuzungspunkte/-flächen der einzelnen Zustände. Mit dieser Verfahrensweise wird man also allein mit Hilfe des erweiterten Fahrplanmodells in der

Lage sein, sich schnell und einfach mögliche LABSE-Experimente auszudenken. Wir wollen noch einmal klar und deutlich sagen, was das erweiterte Fahrplanmodell kann bzw. nicht kann:

- Es kann nur die Bewegungen der Schwerpunkte der Wellenpakete im adiabatischen Grenzfall korrekt wiedergeben.
- Die Bewegung neu erzeugter Wellenpakete kann nur qualitativ angezeigt werden.
- Das Fahrplanmodell kann weder die Lage der Schwerpunkte, noch die Form der neuen Wellenpakete liefern.
- Zerfall oder die Größe der Amplituden der neu entstandenen Wellenpakete können nicht dargestellt werden.

Während der einfache Fahrplan ohne Beimischungen wenigstens im adiabatischen Grenzfall eine korrekte Beschreibung der Propagation der Wellenpakete liefert, ist die Einbeziehung der Bewegung neu entstandener Wellenpakete im Rahmen des erweiterten Fahrplans zum größten Teil Handarbeit. Er zeigt einem nur, was man auch sehen will, da man selbst entscheidet, welche Mischungen man an welcher Stelle einbaut. Nichtsdestotrotz sollte auch die Linien der neuen Wellenpakete eine recht gute Näherung sein, solange man sich nicht zu weit vom adiabatischen Grenzfall entfernt.

### 6.3.3 Berechnung des Spinechosignals

Hat man sich einmal für einen Anfangszustand und eine Feldkonfiguration entschieden, kann man unter Verwendung der Entwicklung für die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung das LABSE-Signal berechnen. Wir wollen in diesem Abschnitt kurz erklären, wie dabei die prinzipielle Vorgehensweise ist.

#### Experimentelle Vorgehensweise zur Messung des LABSE-Signals

In Abschnitt 3.3 haben wir noch den Standpunkt vertreten, dass man den hypothetischen Detektor entlang der  $Z$ -Achse verschiebt, um durch die Kreuzungspunkte (siehe z.B. Abb. 3.8 auf S. 53) zu fahren und an jedem Ort den Fluss der Atome in einem bestimmten Zustand zu messen und aufzuintegrieren. Normiert auf den Gesamtfluss der Atome durch den Detektor ergibt sich dann ein ortsabhängiges Spinechosignal, das die Wahrscheinlichkeit angibt, dass sich ein Atom am Ort  $Z$  im detektierten Zustand befindet.

In der experimentellen Praxis geht man anders vor. Anstatt den Detektor tatsächlich zu verschieben und die Messung an verschiedenen (relativ ungenau bekannten) Orten durchzuführen, platziert man den Detektor an einem festen Ort  $Z_D$ . Dann variiert man durch eine sogenannte  $\Delta\mathcal{B}$ -Spule<sup>3</sup> (siehe [13], Abschnitt 2.9.3, S. 32) das Magnetfeld in der zweiten Spinechospule, so dass sich die relative Lage der Wellenpakete am Ende der zweiten Spule verändert. Dies kann man so lange tun, bis sich jeweils zwei Wellenpakete überlappen, d.h. bis man einen Kreuzungspunkt am Ende des zweiten Magnetfelds vorliegen hat. Durch die identischen Geschwindigkeiten im feldfreien Raum<sup>4</sup> treffen beide Wellenpakete am Detektor ein, ohne ihren Überlapp zu verändern. Durch Variation des  $\Delta\mathcal{B}$ -Feldes verändert man den Überlapp am Detektor und fährt so das gesamte Spinechosignal durch.

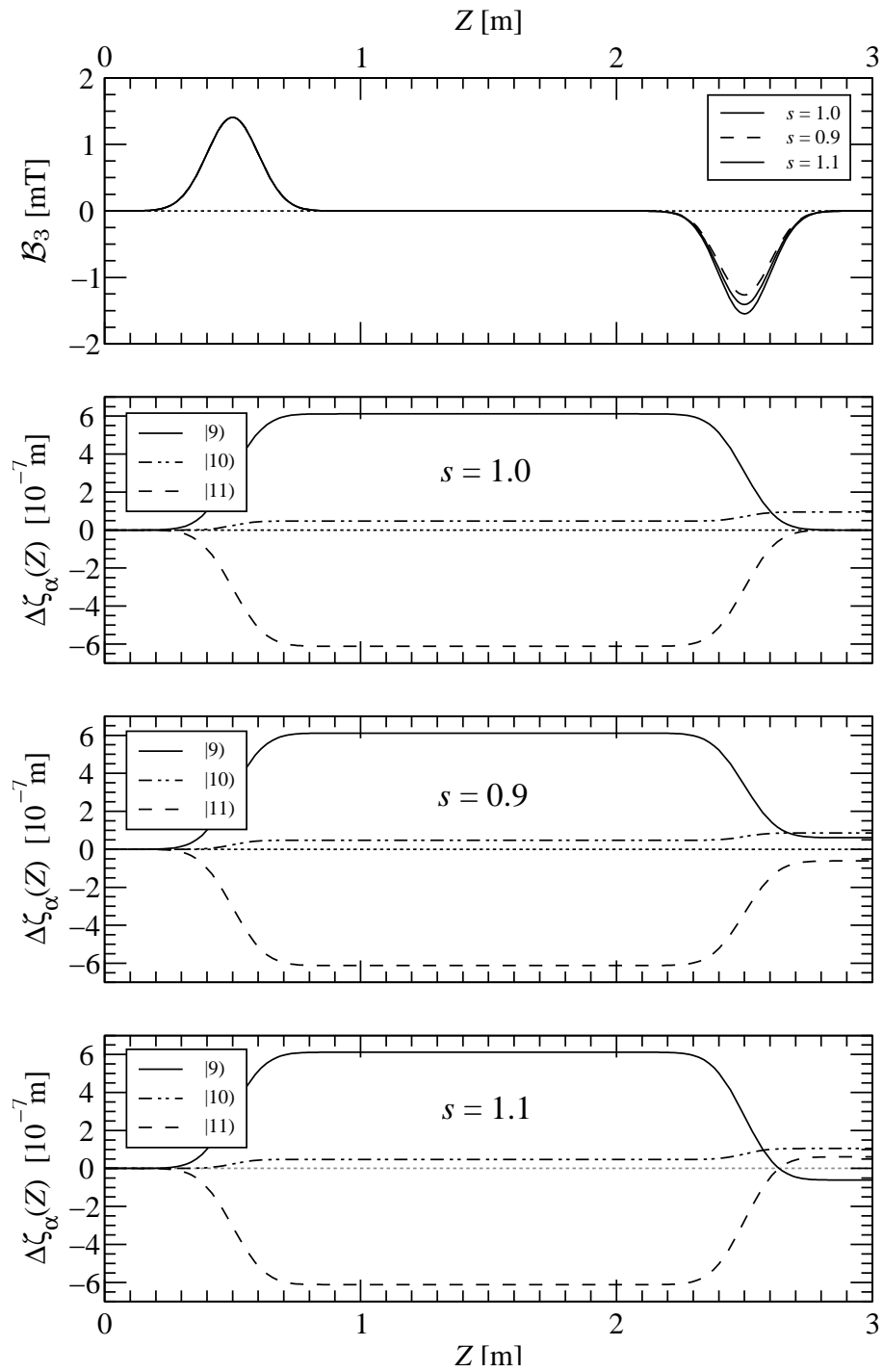
In der Theorie wird die  $\Delta\mathcal{B}$ -Spule durch einen Parameter  $s$  simuliert. In dem oberen Diagramm in Abb. 6.3 haben wir ein grundlegendes Spinechofeld dargestellt<sup>5</sup>. Das zweite Spinechofeld ist stets antiparallel zum ersten Feld und mit diesem für  $s = 1$  betragsmäßig identisch. In den unteren Diagrammen haben wir als Beispiel die adiabatischen Fahrpläne für die gegebenen Spinechofelder und für metastabilen Wasserstoff angegeben. Die Nomenklatur ist dabei wie folgt,

$$|9\rangle = |2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{B}_3\rangle, \quad |10\rangle = |2\hat{S}_{1/2}, 1, 0, \mathcal{B}_3\rangle, \quad |11\rangle = |2\hat{S}_{1/2}, 1, -1, \mathcal{B}_3\rangle, \quad (6.71)$$

<sup>3</sup> Hierbei handelt es sich um einige wenige Windungen, die zusätzlich um die zweite Spinecho-Spule gewickelt werden. Durch Variation des Stroms variiert man das Feld der zusätzlichen Spule und somit das gesamte zweite Spinechofeld.

<sup>4</sup> Wie in Abschnitt 6.1 diskutiert, kann man dies durch im Allgemeinen unterschiedliche Gesamtenergien der Wellenpakete der atomaren Zustände erreichen. Darüberhinaus ist bei einer Superposition entarteter, innerer atomarer Zustände im Anfangszustand sowohl die Gesamtenergie als auch die kinetische Energie im feldfreien Raum identisch.

<sup>5</sup> Beide Spinechofelder haben jeweils ein Magnetfeldintegral von  $50 \mu\text{T} \cdot \text{m}$  und weisen in 3-Richtung.



**Abbildung 6.3:** Veranschaulichung der experimentellen Vorgehensweise. Erläuterungen siehe Text.

siehe auch Anhang B.2.2, Tabelle B.15 auf S. 205. Die beiden Zahlen vor dem Magnetfeld  $\mathcal{B}_3$  stehen für die Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses  $F$  und dessen Projektion  $F_3$  auf die 3-Achse, die beide für das hier betrachtete Feld noch gute Quantenzahlen sind. Das Breit-Rabi-Diagramm für diese Zustände kann Abb. B.4b auf Seite 206 entnommen und gleicht von der äußeren Gestalt her dem Breit-Rabi-Diagramm der Wasserstoff-Grundzustände.

Im Diagramm für  $s = 1$  in Abb. 6.3 erkennt man, dass aufgrund der antisymmetrischen Felder und der antisymmetrischen Energieabhängigkeit der Zustände  $|9\rangle$  und  $|11\rangle$  die Schwerpunkte der zugehörigen Wellenpakete sich am Detektor genau treffen. Der Detektor befindet sich also genau am sogenannten 9-11-Kreuzungspunkt. Wählen wir nun  $s = 0.9$  erhalten wir ein leicht abgeschwächtes zweites Spinechfeld und die Schwerpunkte der Zustände  $|9\rangle$  und  $|11\rangle$  treffen sich nicht mehr am Ende des Feldes. Allerdings liegen nun die Schwerpunkte der Zustände  $|9\rangle$  und  $|10\rangle$  dichter beisammen und man kann sich leicht vorstellen, dass bei einer weiteren Abschwächung des Feldes (also bei noch kleinerem Wert für  $s$ ) irgendwann der 9-10-Kreuzungspunkt erreicht ist. Analog dazu findet man bei  $s > 1.1$  irgendwo den 10-11-Kreuzungspunkt, siehe unteres Diagramm in Abb. 6.3.

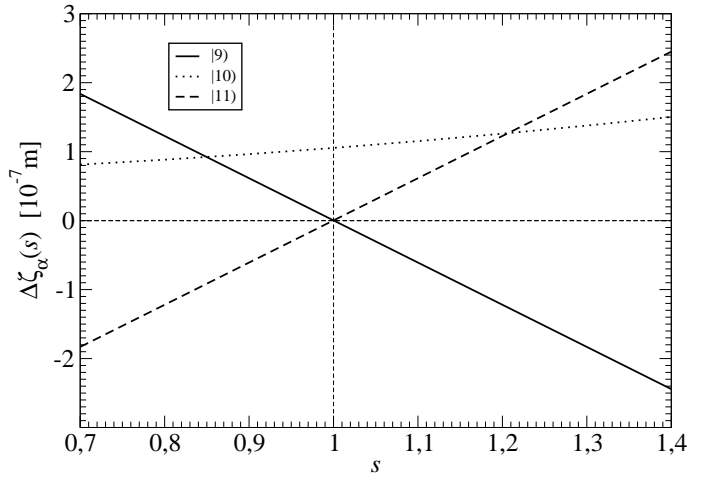
Man kann die Lage der Kreuzungspunkte am festen Ort  $Z_D$  also in Abhängigkeit vom Parameter  $s$  darstellen und würde dann in dem hier betrachteten Beispiel das in Abb. 6.4 gezeigte Bild erhalten. Rein optisch ähnelt dieses Bild stark dem in Abb. 3.8 auf S. 53 gezeigten Fahrplan, der ortsabhängige Kreuzungspunkte für Wasserstoff im Grundzustand bei einem ähnlichen Magnetfeld ( $s = 1$ ) darstellt. Wir würden daher in der  $s$ -Darstellung auch ein ähnliches Signal erhalten wie im ortsabhängigen Fall. In experimentellen Arbeiten gibt es den Skalierungsparameter  $s$  natürlich nicht. Er kann aber direkt mit dem Strom  $\Delta I$  in der  $\Delta\mathcal{B}$ -Spule in Verbindung gebracht werden, siehe hierzu [13], Gl. (2.58) auf S. 32. Es gilt hiernach nämlich die Proportionalität

$$\Delta\mathcal{B} \propto \Delta I \quad (6.72)$$

aber in unserem Fall sicher auch

$$\Delta\mathcal{B} \propto (s - 1) \quad (6.73)$$

also insgesamt  $(s - 1) \propto \Delta I$ .



**Abbildung 6.4:** Die Kreuzungspunkte in Abhängigkeit vom Skalierungsparameter  $s$ , der direkt mit dem Spulenstrom  $\Delta I$  der  $\Delta\mathcal{B}$ -Spule in Verbindung gebracht werden kann.



### Theoretische Vorgehensweise bei der Berechnung des IABSE-Signals

Nachdem man mit der in Abschnitt 6.3.1 beschriebenen Methode die Einhüllende  $\varphi(\zeta)$  sowie die Koeffizienten  $\hat{\chi}_\alpha$  und somit die Anfangswellenpakete  $\varphi_\alpha(\zeta_\alpha(Z) - \tau(t))$  bestimmt hat, kann man mit der Entwicklung, d.h. z.B. in erster Ordnung mit Hilfe von Gleichung (6.47), den Gesamtzustand

$$|\Psi(Z_D, s, t)\rangle = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(Z_D, s, t) |\alpha(Z_D)\rangle = \sum_{\alpha} e^{i\phi_{\alpha}(Z_D, s, t)} A_{\alpha}(Z_D, s, t) |\alpha(Z_D)\rangle . \quad (6.74)$$

am Ort  $Z_D$  des Detektors zu jeder Zeit  $t$  und für jeden Wert des Skalierungsparameters  $s$  berechnen. Wie in Abschnitt 6.2 erläutert, berücksichtigt man dabei die Dispersion des Wellenpakets durch (numerische) Superposition der Entwicklungen für sehr breite Wellenpakete.

Wir gehen wieder davon aus, dass  $Z_D$  hinter allen angelegten Felder liege und können dann

$$|\alpha(Z_0)\rangle = |\alpha(Z_D)\rangle \quad (\alpha = 1, \dots, N) \quad (6.75)$$

voraussetzen (die geometrische Phase (6.28) wurde ja explizit abgespalten).

Die Wellenfunktion, die der Detektor messen wird, hängt von seinem experimentellen Aufbau ab. Wir nehmen hier an, dass der Detektor auf einen gewissen atomaren Zustand

$$|\chi'\rangle := \sum_j \chi'_j |j\rangle = \sum_{\alpha} \hat{\chi}'_{\alpha} |\alpha(Z_D)\rangle , \quad (6.76)$$

empfindlich sein soll. Dieser Zustand muss aus dem atomaren Gesamtzustand herausprojiziert werden. Ist z.B.  $|\chi'\rangle = |\alpha(Z_D)\rangle$  mit einem Index  $\alpha = 1, \dots, N$ , so ist die Wahrscheinlichkeit für die Detektion dieses Zustands das Betragsquadrat des Koeffizienten dieses Zustands im atomaren Gesamtzustand  $|\Psi(Z_D, s, t)\rangle$ . Diesen können wir durch Projektion auf den linken Eigenzustand  $\langle \widetilde{\chi'} | = \langle \chi' |$  aus  $|\Psi(Z_D, s, t)\rangle$  herausfiltern. Hieraus schließen wir, dass wir die detektierte Wellenfunktion für einen allgemeinen Zustand  $|\chi'\rangle$  aus

$$\Psi_{\text{pr}}(Z_D, s, t) := \langle \widetilde{\chi'} | \Psi(Z_D, s, t) \rangle = \sum_{\alpha} \hat{\chi}'_{\alpha}^* \langle \widetilde{\alpha(Z_D)} | \Psi(Z_D, s, t) \rangle . \quad (6.77)$$

erhalten können. Man kann beim Berechnen dieses Ausdrucks dann die Orthogonalität der linken und rechten Eigenvektoren ausnutzen, um die projizierte Wellenfunktion zu erhalten. Wir wollen hier aber auch darauf hinweisen, dass die linken Eigenzustände der nicht-hermiteschen Massenmatrix nicht als physikalische Zustände betrachtet werden können. Erwartungswerte von Operatoren beispielsweise sind nur bzgl. der rechten Eigenzustände definiert.

Mit der Wellenfunktion (6.77) können wir die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho_{\text{pr}}(s, t) := |\Psi_{\text{pr}}(Z_D, s, t)|^2 \quad (6.78)$$

und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j_{\text{pr}}(s, t) := \text{Re} \left[ \Psi_{\text{pr}}^*(Z, s, t) \frac{1}{iM} \frac{\partial}{\partial Z} \Psi_{\text{pr}}(Z, s, t) \right]_{Z=Z_D} \quad (6.79)$$

aufstellen, die in unserem (räumlich) eindimensionalen Fall identisch mit dem Fluss der Atome im Zustand  $|\chi'\rangle$  durch den Detektor ist, d.h.

$$\Phi_{\text{pr}}(s, t) \equiv j_{\text{pr}}(s, t) . \quad (6.80)$$

Hiermit folgt durch Integration über die Zeit (was äquivalent mit dem Zählen und anschließenden Normieren von detektierten Atomen ist) das gesuchte Spinechosignal

$$P_{\chi'}(s) := \int_{t_0}^{\infty} dt \Phi_{\text{pr}}(s, t) , \quad (6.81)$$

das die vom Parameter  $s$  abhängige Wahrscheinlichkeit darstellt, das Atom am Ort  $Z_D$  im Zustand  $|\chi'\rangle$  zu finden. Die für ein Interferenzsignal typischen Oszillationen zeigen sich dann bei Variation des Skalierungsparameters  $s$ , der wie bereits diskutiert den Überlapp der einzelnen Wellenpakete steuert.

Die Integration in (6.81) ist nur von dem Zeitpunkt  $t_0$  an auszuführen, an dem der atomare Anfangszustand präpariert wurde. Gerade bei einem zerfallenden Wellenpaket macht eine Betrachtung für Zeiten  $t < t_0$  keinen Sinn, da der für den Zerfall verantwortliche Phasenfaktor dann ein exponentielles Anwachsen der Amplitude verursachen würde und zu einer Norm des Wellenpakets, die größer als Eins ist. Der Grund dafür liegt darin, dass die Untergrenzenfunktionen  $u_{\alpha}(Z_D, t)$  für  $t < 0$  (wir nehmen hier o.B.d.A.  $t_0 = 0$  an) Werte größer als  $Z_D$  liefern würde. Im für den Zerfall des Wellenpakets verantwortlichen Anteil des Phasenwinkels, der eine Integration von  $u_{\alpha}(Z_D, t)$  bis  $Z_D$  über die lokale Zerfallsrate des Zustands mit Index  $\alpha$  ist, würde dann bei Vertauschung der Integralgrenzen ein zusätzliches Minuszeichen auftreten.

---

# Kapitel 7

---

## Paritätsverletzende Berry-Phasen in Wasserstoff

---

### 7.1 Allgemeine Einführung in geometrische Phasen

Im Jahre 1984 führte M.V. Berry die nach ihm benannte geometrische Berry-Phase bei adiabatischen Zustandsänderungen in der Quantenmechanik ein [45]. Wir wollen in diesem Abschnitt die Grundlagen für die Behandlung geometrischer Phasen angeben, wobei wir die Notation der Originalarbeit [45] von Berry übernommen haben.

Betrachten wir zunächst die Schrödinger-Gleichung eines rein zeitabhängigen Systems,

$$H(t)|t\rangle = i\partial_t|t\rangle . \quad (7.1)$$

Die Abhängigkeit des Hamiltonoperators von der Zeit sei nun implizit über die Zeitabhängigkeit verschiedener Parameter gegeben, die wir hier zu einem  $r$ -dimensionalen Vektor  $\mathbf{R}(t) = \sum_{i=1}^r R_i(t)\mathbf{e}_i$  zusammenfassen wollen. Hiermit können wir den sogenannten Parameterraum, d.h. die Menge aller möglichen Konfigurationen des Parametervektors  $\mathbf{R}(t)$ , definieren. Betrachten wir einen sich adiabatisch ändernden Hamiltonoperator, so wird der Vektor  $\mathbf{R}(t)$  im Parameterraum entlang einer Kurve  $\mathcal{C}$  laufen. Die Schrödinger-Gleichung lautet nun mit  $H(t) = \hat{H}(\mathbf{R}(t))$

$$\hat{H}(\mathbf{R}(t))|t\rangle = i\partial_t|t\rangle . \quad (7.2)$$

Wir können nun für jeden Wert von  $\mathbf{R}$  das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators lösen, d.h.

$$\hat{H}(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle , \quad (n = 1, \dots, N) . \quad (7.3)$$

Diese Eigenwertgleichung legt die Beziehung der relativen Phase der Zustände  $|n(\mathbf{R})\rangle$  für verschiedene  $\mathbf{R}$  nicht fest, wir können hierfür irgendeine differenzierbare, lokale Phase

(d.h. abhängig von  $\mathbf{R}$ ) wählen. Der Gesamtzustand  $|t\rangle$  kann daher stets als Superposition der lokalen Eigenvektoren von  $\hat{H}(\mathbf{R})$  in der Form

$$|t\rangle = \sum_n c_n \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t dt' E_n(\mathbf{R}(t')) \right\} \exp \{i\gamma_n(t)\} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (7.4)$$

geschrieben werden. Hierbei wurde bereits die adiabatische Näherung verwendet, bei der die Koeffizienten  $c_n$  zeitunabhängig sind, d.h. ein Zustand  $|t_0\rangle$ , der in einem Eigenzustand  $|n(\mathbf{R}(t_0))\rangle$  präpariert ist, bleibt für alle Zeiten  $t$  in diesem (sich zeitlich verändernden) Zustand  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ .

Setzen wir nun  $|t\rangle$  in die Schrödinger-Gleichung ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} & \sum_n c_n \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t dt' E_n(\mathbf{R}(t')) \right\} \exp \{i\gamma_n(t)\} E_n(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle \\ &= \sum_n c_n \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t dt' E_n(\mathbf{R}(t')) \right\} \exp \{i\gamma_n(t)\} (E_n(\mathbf{R}(t)) - \dot{\gamma}_n(t) + i\partial_t) |n(\mathbf{R}(t))\rangle . \end{aligned} \quad (7.5)$$

Die Beiträge proportional zu  $E_n(\mathbf{R}(t))$  können auf beiden Seiten subtrahiert werden. Multiplizieren wir von links mit einem linken<sup>1</sup> Eigenzustand  $\langle m(\widetilde{\mathbf{R}}(t))|$ , so können wir die (hier angenommene) Orthogonalität der Eigenvektoren von  $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$  ausnutzen und erhalten schließlich

$$\begin{aligned} c_m \dot{\gamma}_m(t) &= i \sum_n c_n \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t dt' (E_n(\mathbf{R}(t')) - E_m(\mathbf{R}(t'))) \right\} \\ &\quad \times \exp \{i(\gamma_n(t) - \gamma_m(t))\} \langle m(\widetilde{\mathbf{R}}(t)) | \partial_t | n(\mathbf{R}(t)) \rangle . \end{aligned} \quad (7.6)$$

Im adiabatischen Grenzfall gilt

$$\langle m(\widetilde{\mathbf{R}}(t)) | \partial_t | n(\mathbf{R}(t)) \rangle \approx 0 , \quad (m \neq n) , \quad (7.7)$$

da in diesem Fall nach Voraussetzung Übergänge zwischen den einzelnen Eigenzuständen aufgrund der zeitlichen Änderung der äußeren Parameter vernachlässigt werden. Somit verbleibt

$$\dot{\gamma}_n(t) = i \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}(t)) | \partial_t | n(\mathbf{R}(t)) \rangle \quad (7.8)$$

---

<sup>1</sup>Ist  $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$  hermitesch, so ist der linke Bravektor natürlich gleich dem hermitesch konjugierten, rechten Ketvektor. Da wir in der vorliegenden Arbeit aber auch nichthermitesche Matrixdarstellungen des Hamiltonoperators berücksichtigen, wollen wir die Diskussion an dieser Stelle möglichst allgemein halten. Wir weichen diesbezüglich von der Originalarbeit [45] ab.

---

bzw.

$$\gamma_n(t) = i \int_{t_0}^t dt' \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}(t')) | \partial_{t'} | n(\mathbf{R}(t')) \rangle = i \int_{\mathcal{C}(t_0, t)} d\mathbf{R}' \cdot \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle . \quad (7.9)$$

Dabei ist  $\mathcal{C}(t_0, t)$  die Kurve im Parameterraum, die in der Zeit von  $t_0$  bis  $t$  von der Spitze des Parametervektors  $\mathbf{R}(t')$  beschrieben wird. Ist der Weg bei einer Zeit  $t = T$  geschlossen, d.h.  $\mathbf{R}(t_0) = \mathbf{R}(T)$ , so schreiben wir einfach

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = i \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R}' \cdot \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle . \quad (7.10)$$

Ist der zugrundeliegende Hamiltonoperator hermitesch, also

$$\langle n(\widetilde{\mathbf{R}}(t)) | = | n(\mathbf{R}(t)) \rangle^\dagger = \langle n(\mathbf{R}(t)) | , \quad (7.11)$$

so kann man aus der Normierung der Zustände leicht zeigen<sup>2</sup>, dass

$$\langle n(\mathbf{R}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle \in i\mathbb{R} \quad (7.12)$$

gilt, also

$$\gamma_n(t) \in \mathbb{R} \quad (\text{falls } \hat{H} = \hat{H}^\dagger) . \quad (7.13)$$

Ist dagegen  $\hat{H} \neq \hat{H}^\dagger$ , so gilt zwar aufgrund der Normierung der rechten Eigenvektoren Gl. (7.12) immer noch, jedoch gilt mit der Normierung der linken und rechten Eigenvektoren auch

$$\langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle^* = -\langle n(\mathbf{R}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\widetilde{\mathbf{R}}') \rangle \quad (7.14)$$

Im allgemeinen wird bei Verwendung nichthermitescher Hamiltonoperatoren die geometrische Phase also einen Real- und einen Imaginärteil haben,

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \gamma_n(t) &= \frac{1}{2} (\gamma_n(t) + \gamma_n^*(t)) \\ &= \frac{i}{2} \int_{\mathcal{C}(t_0, t)} d\mathbf{R}' \cdot \left( \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle - \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle^* \right) , \end{aligned} \quad (7.15a)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \gamma_n(t) &= \frac{1}{2i} (\gamma_n(t) - \gamma_n^*(t)) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}(t_0, t)} d\mathbf{R}' \cdot \left( \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle + \langle n(\widetilde{\mathbf{R}}') | \nabla_{\mathbf{R}'} | n(\mathbf{R}') \rangle^* \right) . \end{aligned} \quad (7.15b)$$

---

<sup>2</sup> Es ist  $1 = \langle n(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R}) \rangle$ , also  $0 = \nabla_{\mathbf{R}} \langle n(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R}) \rangle = \langle n(\mathbf{R}) | \overleftarrow{\nabla_{\mathbf{R}}} | n(\mathbf{R}) \rangle + \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle$ . Damit folgt  $\langle n(\mathbf{R}) | \overleftarrow{\nabla_{\mathbf{R}}} | n(\mathbf{R}) \rangle = \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle^* = -\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle$ , also  $\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \in i\mathbb{R}$ .

---

## 7.2 Geometrische Phasen im Kontext der vorliegenden Arbeit

Bei der Lösung der matrixwertigen Schrödinger-Gleichung mit Hilfe des Entwicklungformalismus in Kapitel 6 haben wir bereits den geometrischen Anteil (6.28),

$$\gamma_\alpha(Z, t) := \Phi_\alpha^{\text{geom}}(Z, t) = i \int_{u_\alpha(Z, t)}^Z dZ' (\alpha(\widetilde{Z'}) | \partial_{Z'} | \alpha(Z')) \quad (7.16)$$

im Phasenwinkel berücksichtigt. Wären wir bei der Umformung der Schrödinger-Gleichung in Abschnitt 6.1 zunächst von einem Phasenwinkel ohne geometrischen Anteil ausgegangen, so hätten wir in erster Ordnung der Entwicklung (wie z.B. auch in Abschnitt 5.2) sicher erkannt, dass eine entsprechende Korrektur des Phasenwinkels nötig ist. Wir können also behaupten, dass bei dem in Kapitel 6 vorgestellten Formalismus zur Berechnung der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung die geometrische Phase automatisch auftritt.

Die in der vorliegenden Arbeit auftretende geometrische Phase (7.16) ist direkt zu vergleichen mit dem Ausdruck in Gl. (7.9). Wir haben hier allerdings die Orts- und Zeitabhängigkeit zu berücksichtigen. In diesem Zusammenhang tritt an die Stelle der Zeitintegration die Integration über den Ort mit der üblichen, zeitabhängigen Untergrenze  $u_\alpha(Z, t)$  aus Gl. (6.27),

$$u_\alpha(Z, t) := \mathcal{Z}_\alpha(\zeta_\alpha(Z) - \tau(t)) . \quad (7.17)$$

Setzen wir uns bei der Beobachtung des Wellenpakets an den Ort  $Z_D$  des Detektors hinter allen äußeren Feldern, so trägt zu einer Zeit  $t$  nur das Ortsintervall  $[u_\alpha(Z_D, t), Z_D]$  zur geometrischen Phase bei, das in der Zeit  $t$  bis zum Detektor vom Wellenpaket durchlaufen werden konnte.

Betrachten wir nun ausschließlich den adiabatischen Grenzfall, d.h. die nullte Ordnung der Entwicklung der Wellenfunktion und somit die Wellenpakete (6.46),

$$\Psi_\alpha(Z_D, t) = e^{i\phi_\alpha(Z_D, t)} \varphi_\alpha(\zeta_\alpha(Z_D) - \tau(t)) \quad (7.18)$$

für die einzelnen Komponenten des atomaren Gesamtzustands  $|\Psi(Z, t)\rangle$ . Wir wollen nun zeigen, dass die in (7.16) auftretende Integraluntergrenze bei der Berechnung eines Spinechosignals unter einigen Annahmen durch die Konstante  $Z_0$  ersetzt werden kann. Bei der Berechnung eines solchen Signals ist nur der sehr kleine Zeitraum relevant, während dessen die Wellenpakete am Detektorort  $Z_D$  eintreffen, also die  $\varphi_\alpha(\zeta_\alpha(Z_D) - \tau(t))$  signifikant von Null verschieden sind.

---

Der Schwerpunkt des Wellenpakets mit Index  $\alpha$  wird sich nach Gl. (6.63) zur Zeit

$$T_\alpha(Z_D) = \frac{M}{\bar{k}} \zeta_\alpha(Z_D) = \int_{Z_0}^{Z_D} dZ \frac{M}{k_\alpha(Z)} \quad (7.19)$$

am Detektorort befinden. Wir können hier ohne große Einschränkungen fordern, dass die Feldkonfiguration am Ort  $Z_D$  des Detektors identisch mit der Feldkonfiguration in einem Bereich mit der Breite des Wellenpakets um den Anfangsort  $Z_0$  sei. Wir stellen weiter fest, dass

$$\begin{aligned} u_\alpha(Z_D, T_\alpha(Z_D)) &= \mathcal{Z}_\alpha \left( \zeta_\alpha(Z_D) - \frac{\bar{k}}{M} T_\alpha(Z_D) \right) \\ &= \mathcal{Z}_\alpha(\zeta_\alpha(Z_D) - \zeta_\alpha(Z_D)) = \mathcal{Z}_\alpha(0) = Z_0, \end{aligned} \quad (7.20)$$

gilt. Wir können also davon ausgehen, dass während der Zeit des Eintreffens des Wellenpakets am Ort des Detektors der Wert der Untergrenzenfunktion  $u_\alpha(Z_D, t)$  stets in dem Bereich um  $Z_0$  liegt, bei dem die gleiche Feldkonfiguration wie am Ort  $Z_D$  herrscht. Der Wert der geometrischen Phase wird sich dann während dieser Zeit nicht mehr verändern und wir können den vereinfachten Ausdruck

$$\gamma_\alpha(\mathcal{C}) = i \int_{Z_0}^{Z_D} dZ (\alpha(\widetilde{Z}) | \partial_Z | \alpha(Z)) \quad (7.21)$$

betrachten, wobei  $\mathcal{C}$  wieder die (geschlossene) Kurve im Parameterraum ist, die im Intervall von  $Z_0$  bis  $Z_D$  durchlaufen wird.

Da wir nur IABSE-Experimente mit statischen elektrischen und magnetischen Feldern in Betracht ziehen wollen, ist der Parameterraum in unserem Fall der sechsdimensionale Raum ( $r = 6$ ) der Feldstärken und der Parametervektor  $\mathbf{R}$  lässt sich in der Form

$$\mathbf{R} = (\mathcal{E}, \mathcal{B}) \quad (7.22)$$

schreiben. Wir wollen nun in Analogie zur Vorgehensweise in der Originalarbeit von M.V. Berry [45], die geometrische Phase (7.21) in ein Flächenintegral im Parameterraum umschreiben. Wir benötigen dazu mathematische Hilfsmittel aus der Theorie der Differentialformen, nämlich die äußere Ableitung

$$d := \sum_{i=1}^r dR_i \frac{\partial}{\partial R_i} \quad (7.23)$$

und das äußere Produkt  $\wedge$  (auch Keilprodukt<sup>3</sup> genannt). Wir begnügen uns hier mit der einfachen Anwendung der Rechenregeln für die äußere Ableitung und das Keilprodukt.

---

<sup>3</sup>Engl.: *wedge product*.

Die mathematischen Hintergründe können in den ersten Kapiteln des Buches über Differentialformen von H. Flanders [46] nachgelesen werden.

Das Keilprodukt ist eine Verallgemeinerung des Kreuzprodukts, wobei es nicht auf Vektoren, sondern auf die sogenannten 1-Formen wirkt. Ein Beispiel für eine 1-Form sind die differentiellen Komponenten des Parametervektors  $dR_i$ , die z.B. in der Definition (7.23) der äußeren Ableitung vorkommen. Die wesentliche Eigenschaft des Keilprodukts ist die Antisymmetrie, d.h. man vereinbart

$$dR_i \wedge dR_j = -dR_j \wedge dR_i , \quad (7.24)$$

woraus man bereits die Eigenschaft

$$dR_i \wedge dR_j = 0 \quad \text{für } i = j \quad (7.25)$$

ableiten kann. Eine weitere Konsequenz der Antisymmetrie ist das Verschwinden der zweifachen äußeren Ableitung einer 0-Form (d.h. einer gewöhnlichen Funktion des Parametervektors  $\mathbf{R}$ ). Es gilt nämlich das sogenannte Poincaré-Lemma

$$\begin{aligned} ddf(\mathbf{R}) &= \sum_{i,j=1}^r dR_i \wedge dR_j \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial R_j} f(\mathbf{R}) \\ &= \sum_{i < j} dR_i \wedge dR_j \left( \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial R_j} - \frac{\partial}{\partial R_j} \frac{\partial}{\partial R_i} \right) f(\mathbf{R}) \\ &= 0 . \end{aligned} \quad (7.26)$$

Hier wurde die Vertauschbarkeit der partiellen Ableitungen ausgenutzt. In der Terminologie der Theorie der Differentialformen bezeichnet man also Funktionen wie  $f(\mathbf{R})$  als 0-Formen und Ausdrücke, die nur einfache differentielle Größen  $dR_i$  enthalten als 1-Form. Das  $n$ -fache Keilprodukt von 1-Formen bezeichnet man als  $n$ -Form. Hiermit wollen wir diesen kleinen Ausflug in die Theorie der Differentialformen abschließen und uns wieder der geometrischen Phase (7.21) zuwenden.

Wir betrachten die in Gl. (6.31) definierten Matrixelemente der Ortsableitung,

$$\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\beta}^{(1)}(Z) = (\alpha(\widetilde{Z}) | \partial_Z | \beta(Z)) . \quad (7.27)$$

Die geometrische Phase (7.21) ist das Integral über das Diagonalelement  $\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z)$  über eine mit  $Z$  parametrisierte, geschlossene Kurve  $\mathcal{C}$  im Parameterraum. Die Abhängigkeit der Zustände von  $Z$  geht nur implizit über die Abhängigkeit von den äußeren Feldern in die atomaren Zustände ein, wir können also auch

$$|\alpha(Z)\rangle \equiv |\alpha(\mathbf{R}(Z))\rangle , \quad (\alpha(\widetilde{Z}) | \equiv (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}}(Z) | \quad (7.28)$$



schreiben. Das Matrixelement  $\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z)$  kann dann als

$$\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z) = (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}}(Z))|\partial_Z|\alpha(\mathbf{R}(Z))) = \sum_{i=1}^r (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|\frac{\partial}{\partial R_i}|\alpha(\mathbf{R}))|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}(Z)} \frac{dR_i(Z)}{dZ} \quad (7.29)$$

geschrieben werden und die geometrische Phase somit als

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha(\mathcal{C}) &= i \int_{Z_0}^{Z_D} dZ \underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z) = i \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|\nabla_{\mathbf{R}}|\alpha(\mathbf{R})) \\ &= i \oint_{\mathcal{C}} (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) . \end{aligned} \quad (7.30)$$

Wir haben hier die kompakte Schreibweise mit dem Operator  $d$  der äußeren Ableitung aus (7.23) verwendet, die wir auch im Folgenden beibehalten wollen. Es gilt dabei

$$d|\alpha(\mathbf{R})\rangle = \sum_{i=1}^r \frac{\partial}{\partial R_i} |\alpha(\mathbf{R})\rangle dR_i . \quad (7.31)$$

Wir können nun den verallgemeinerten Stokes'schen Satz ([46], Abschnitt 5.8, S. 64) anwenden und erhalten ein Flächenintegral über eine 2-Form über eine von der Kurve  $\mathcal{C}$  umrandete Fläche  $\mathcal{F}$  im Parameterraum:

$$\gamma_\alpha(\mathcal{C}) = i \oint_{\mathcal{C}=\partial\mathcal{F}} (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) = i \int_{\mathcal{F}} d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) . \quad (7.32)$$

Mit den Rechenregeln für das Keilprodukt und die äußere Ableitung können wir den Integranden berechnen und erhalten

$$\begin{aligned} d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) &= \left( d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|) \right) d|\alpha(\mathbf{R})\rangle + (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|dd|\alpha(\mathbf{R})) \\ &= \left( d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|) \right) d|\alpha(\mathbf{R})\rangle \\ &= \sum_{i,j} (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})| \left( \overleftarrow{\partial}_i \partial_j \right) |\alpha(\mathbf{R})\rangle dR_i \wedge dR_j \\ &= \sum_{i < j} (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})| \left( \overleftarrow{\partial}_i \partial_j - \overleftarrow{\partial}_j \partial_i \right) |\alpha(\mathbf{R})\rangle dR_i \wedge dR_j \end{aligned} \quad (7.33)$$

Im ersten Schritt wurde das Poincaré-Lemma (7.26) angewendet und im letzten Schritt die Antisymmetrie (7.24) des Keilprodukts ausgenutzt, um die Summe nur über  $i < j$  laufen zu lassen. Wir haben hier außerdem die verkürzte Schreibweise

$$\partial_i = \frac{\partial}{\partial R_i} \quad (7.34)$$

verwendet.

In Berrys Originalarbeit [45] wird an dieser Stelle eine Eins in der Form  $\mathbb{1} = \sum_{m \neq n} |m\rangle\langle m|$  eingeschoben. Danach wird verwendet, dass bei Eigenzuständen  $|n\rangle$  eines hermiteschen Hamiltonoperators die geometrische Phase wegen  $\langle n(\mathbf{R})|d|n(\mathbf{R})\rangle \in i\mathbb{R}$  reell ist. Wir haben bereits am Ende des letzten Abschnitts gezeigt, dass diese Argumentation bei den Eigenzuständen der nichthermiteschen Massenmatrix nicht mehr angewendet werden kann. In der Schreibweise mit der äußeren Ableitung lautet die zu (7.14) analoge Gleichung

$$(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) = - \left( d(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|) \right) |\alpha(\mathbf{R})\rangle , \quad (7.35)$$

sie folgt aus

$$d(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|\alpha(\mathbf{R})) = d\delta_{\beta\alpha} = 0 . \quad (7.36)$$

Aus der Normierungsbedingung für rechte Eigenzustände,  $(\alpha(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})) = 1$ , erhält man zwar auch weiterhin

$$(\alpha(\mathbf{R})|d|\alpha(\mathbf{R})) \in i\mathbb{R} , \quad (7.37)$$

diese Bedingung hilft uns hier jedoch nicht weiter, da wir für die Eigenzustände der nichthermiteschen Massenmatrix nur eine Vollständigkeitsrelation für Quasiprojektoren (A.21d) zur Verfügung haben. Durch Einschieben dieser Vollständigkeitsrelation erhalten wir aus (7.33) unter Verwendung von (7.36)

$$\begin{aligned} d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) &= \left( d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|) \right) d|\alpha(\mathbf{R})\rangle = \sum_{\beta} \left( d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|) \right) |\beta(\mathbf{R})\rangle (\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) \\ &= - \sum_{\beta} (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\beta(\mathbf{R})) (\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) . \end{aligned} \quad (7.38)$$

Der Beitrag zur Summe mit  $\beta = \alpha$  verschwindet, denn es gilt

$$\begin{aligned} & \left( d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|) \right) |\alpha(\mathbf{R})\rangle (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) \\ & \stackrel{(7.36)}{=} -(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) \\ & \stackrel{(7.23)}{=} - \sum_{i,j=1}^r (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|\partial_i|\alpha(\mathbf{R})) (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|\partial_j|\alpha(\mathbf{R})) dR_i \wedge dR_j \\ & \stackrel{(7.24)}{=} - \sum_{i < j} \left[ (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|\partial_i|\alpha(\mathbf{R})) (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|\partial_j|\alpha(\mathbf{R})) - (i \leftrightarrow j) \right] dR_i \wedge dR_j \\ & = 0 \end{aligned} \quad (7.39)$$

und somit lautet der Integrand von Gl. (7.32)

$$d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) = - \sum_{\beta \neq \alpha} (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\beta(\mathbf{R}))(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) . \quad (7.40)$$

Nun werfen wir einen Blick auf die Eigenwertgleichung für die Zustände  $|\alpha(\mathbf{R})\rangle$ ,

$$\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})\rangle = E_\alpha(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})\rangle \quad (7.41)$$

und gehen im folgenden stets von nichtentarteten Zuständen bei allen betrachteten Parametervektoren  $\mathbf{R}$  aus, d.h.

$$\alpha \neq \beta \quad \Longleftrightarrow \quad E_\alpha(\mathbf{R}) \neq E_\beta(\mathbf{R}) . \quad (7.42)$$

Wenden wir hierauf die äußere Ableitung an, so folgt

$$\begin{aligned} d(\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})) &= (d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})) + \underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})d|\alpha(\mathbf{R}) \\ &= d(E_\alpha(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})) \\ &= (dE_\alpha(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})) + E_\alpha(\mathbf{R})d|\alpha(\mathbf{R}) . \end{aligned} \quad (7.43)$$

Aus der Projektion von links mit  $(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|$  folgt man, dass die äußere Ableitung des Eigenwerts  $E_\alpha(\mathbf{R})$  gleich dem Diagonalelement der äußeren Ableitung der Massenmatrix ist:

$$dE_\alpha(\mathbf{R}) = (\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|(d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})) . \quad (7.44)$$

Aus der Projektion von links mit  $(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|$  ( $\beta \neq \alpha$ ) erhält man aus Gl. (7.43)

$$(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) = \frac{(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|(d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R}))}{E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R})} \stackrel{(7.35)}{=} - \left( d(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|) |\alpha(\mathbf{R}) \right) . \quad (7.45)$$

Hiermit können wir den Integranden (7.40) des Flächenintegrals der geometrischen Phase nach direkt umschreiben in

$$d(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\alpha(\mathbf{R})) = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|(d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\beta(\mathbf{R}))(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|(d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R}))}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} . \quad (7.46)$$

Das Minuszeichen aus (7.33) wurde hier durch die Vertauschung der Energieeigenwerte im Nenner von  $(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|d|\beta(\mathbf{R}))$  beseitigt. Mit diesem Ergebnis lautet die geometrische Phase (7.32) also unter der Voraussetzung (7.42)

$$\gamma_\alpha(\mathcal{C}) = i \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{\mathcal{F}} \frac{(\alpha(\widetilde{\mathbf{R}})|(d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\beta(\mathbf{R}))(\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|(d\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R}))}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} . \quad (7.47)$$

Diese Gleichung entspricht Gl. (10) in Berrys Originalarbeit [45], die allerdings nur für einen dreidimensionalen Parameterraum gilt. In der Diskussion dieser Gleichung macht Berry jedoch die Bemerkung, dass für einen höherdimensionalen Parameterraum die Kreuzprodukte durch Keilprodukte zu ersetzen sind und die Gradienten durch äußere Ableitungen, was dann genau auf eine zu (7.47) äquivalente Form der Gl. (10) aus Berrys Arbeit führt. Wir haben hier allerdings durch die Berücksichtigung nichthermitescher Hamiltonoperatoren ein noch allgemeineres Resultat erhalten.

## 7.3 Paritätsverletzende geometrische Phasen

### 7.3.1 Paritätsverletzung in Atomen

Wie in der Einleitung (Kap. 1) bereits erwähnt, wird Paritätsverletzung in Atomen bereits seit 30 Jahren theoretisch und experimentell untersucht [23]. In dieser Arbeit, die eine Fortsetzung von [32, 31, 33, 34, 35, 36] ist, wollen wir im Gegensatz zu den üblicherweise betrachteten, schweren Atomen die leichtesten Atome studieren, insbesondere Wasserstoff und Deuterium.

In [31] und [35] wurden Wege angegeben, wie man die P-verletzenden Effekte in leichten Atomen theoretisch so verstärken kann, dass sie prinzipiell auch experimentell nachweisbar werden könnten. Wir haben die Hoffnung, dass die in dieser Arbeit untersuchte Atomstrahl-Spino-Methode [12] verwendet werden kann, um P-verletzende Effekte in Wasserstoff oder Deuterium zu messen. In diesem Zusammenhang besteht eine enge Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von PD M. DeKieviet, PhD., dem wir an dieser Stelle besonders für sein Engagement danken wollen.

Wir wollen hier nur einige Anmerkungen dazu machen, wie man Paritätsverletzung formal in der Massenmatrix  $\mathcal{M}(Z)$  berücksichtigen kann und für genauere Informationen auf Anhang B.1.2 und die dort zitierten Referenzen verweisen. In der Diplomarbeit [36] findet sich eine ausführliche Herleitung der Matrixelemente des P-verletzenden Hamiltonoperators. Ausgangspunkt bildet dabei die effektive Lagrange-Dichte der vier-Fermion-Kopplung zwischen Elektron und Quarks, die den neutralen, schwachen Strom enthält. Der aus diesem Teil der Lagrange-Dichte folgende Hamiltonoperator kann mit der nichtrelativistischen Reduktion auf die in Atomen herrschenden Verhältnisse angepasst werden.

---

Als Ergebnis erhält man einen P-verletzenden Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}
 H_{\text{PV}} &= H_{\text{PV}}^{(1)} + H_{\text{PV}}^{(2)} , \\
 H_{\text{PV}}^{(1)} &= \frac{G}{4\sqrt{2}} \frac{Q_W^{(1)}}{m_e} \left\{ \delta^3(\mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\delta^3(\mathbf{x}) \right\} , \\
 H_{\text{PV}}^{(2)} &= \frac{G}{4\sqrt{2}} \frac{Q_W^{(2)}}{m_e} \left\{ \delta^3(\mathbf{x})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{p})\delta^3(\mathbf{x}) \right\} ,
 \end{aligned} \tag{7.48}$$

wobei  $\mathbf{x}$  der Ortsoperator des Elektrons (relativ zum Ort des Atomkerns) ist,  $\mathbf{p}$  der Operator des Elektronimpulses,  $\boldsymbol{\sigma}$  der Elektronspin und  $\mathbf{I}$  der Kernspin. Weiterhin treten die Fermi-Konstante  $G$ , die Elektronmasse  $m_e$  sowie die sogenannten schwachen Kernladungen  $Q_W^{(1)}$  und  $Q_W^{(2)}$  auf, die bereits in der Einleitung diskutiert wurden.

Die Matrixelemente von  $H_{\text{PV}}$ , die sich bezüglich der Gesamtdrehimpulsbasis  $|2L_J, F, F_3\rangle$  ergeben, sind im Anhang B.1.2 in Gl. (B.9) aufgeführt. Sie treten (natürlich) nur zwischen Zuständen unterschiedlicher Parität auf, d.h. im Unterraum mit Hauptquantenzahl  $n = 2$  nur zwischen  $S$ - und  $P$ -Zuständen. Da  $H_{\text{PV}}$  als Skalarprodukt von Operatoren offenbar rotationsinvariant ist, gibt es weiterhin (im feldfreien Raum) nur Mischungen zwischen Zuständen mit gleichem Gesamtdrehimpuls  $F$  und gleicher dritter Komponente  $F_3$ .

Die Matrixdarstellungen des Operators  $H_{\text{PV}}$  wollen wir im Folgenden mit

$$\left( \langle 2L'_J, F', F'_3 | H_{\text{PV}} | 2L_J, F, F_3 \rangle \right) = \delta_1 \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(1)} + \delta_2 \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(2)} \tag{7.49}$$

bezeichnen, wobei wir die in (B.9) auftretenden, P-verletzenden Parameter  $\delta_1$  und  $\delta_2$  (siehe Gl. (B.10) aus Anhang B.1.1) explizit ausgeklammert haben, da wir später eine Störungsentwicklung nach diesen sehr kleinen Parametern machen wollen. In der nun folgenden Rechnung werden wir stellvertretend für diese Summe von Matrizen die Schreibweise  $\delta \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}$  verwenden.

Die gesamte Massenmatrix für das zu beschreibende (neutrale) Atom in einem statischen elektrischen und magnetischen Feld, die sich aus den Rechnungen in Anhang B.1.2 ergibt<sup>4</sup>, lautet also

$$\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R}(Z), \delta_1, \delta_2) = \underline{\mathcal{M}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}(Z), \boldsymbol{\mathcal{B}}(Z), \delta_1, \delta_2) = \underline{\mathcal{M}}_0(\delta_1, \delta_2) - \underline{\mathbf{D}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}(Z) - \underline{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}(Z) , \tag{7.50}$$

wobei der freie Teil  $\underline{\mathcal{M}}_0(\delta_1, \delta_2)$  der Massenmatrix die P-verletzenden Beiträge enthält, d.h.

$$\underline{\mathcal{M}}_0(\delta_1, \delta_2) = \underline{\mathcal{M}}_0 + \delta_1 \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(1)} + \delta_2 \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(2)} \sim \underline{\mathcal{M}}_0 + \delta \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}} . \tag{7.51}$$

---

<sup>4</sup>Eine sehr ausführliche Herleitung und Diskussion des Hamiltonoperators eines Atoms in einem allgemeinen elektrischen und magnetischen Feld findet sich in [33], Anhang A, S. 131ff.

### 7.3.2 Geometrische Flussdichten im Raum der elektrischen und magnetischen Feldstärke

Wir kehren nun zurück zur geometrischen Phase aus Gl. (7.47). Dort wollen wir die äußere Ableitung der Massenmatrix nun explizit einsetzen. In den folgenden Gleichungen haben wir die P-verletzenden Parameter  $\delta_{1,2}$  nicht explizit ausgeschrieben, da die hier berechneten Formeln allgemein gültig sind. Wir werden im nächsten Abschnitt die Massenmatrix und ihre Eigenzustände durch ihre Störungsentwicklung nach  $\delta_{1,2}$  ersetzen und dann sehen, dass die Formeln dieses Abschnitts formal für den P-erhaltenden Beitrag nullter Ordnung übernommen werden können. Wir weisen darauf hin, dass lokale Matrixelemente der Gestalt  $\mathcal{M}_{\alpha\beta}(\mathbf{R})$  in diesem Abschnitt stets bzgl. der Basis der lokalen Eigenzustände  $|\alpha(\mathbf{R})\rangle$  der vollen Massenmatrix (inkl. der P-verletzenden Beiträge) zu verstehen sind. Im nächsten Abschnitt werden wir dagegen vereinbaren, dass diese Matrixelemente nur bzgl. der Eigenzustände des P-erhaltenden Anteils der Massenmatrix zu verstehen sind.

Mit  $\mathcal{M}(\mathbf{R})$  aus (7.50) und  $\mathbf{R} = (\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  folgt

$$d\mathcal{M}(\mathbf{R}) = \sum_{i=1}^r \frac{\partial \mathcal{M}(\mathbf{R})}{\partial R_i} dR_i = -\underline{\mathbf{D}} \cdot d\boldsymbol{\mathcal{E}} - \underline{\boldsymbol{\mu}} \cdot d\boldsymbol{\mathcal{B}}. \quad (7.52)$$

Definieren wir nun also die lokalen Matrixelemente des Dipoloperators  $\underline{\mathbf{D}}$  und des Operators des magnetischen Moments  $\underline{\boldsymbol{\mu}}$  als

$$\underline{\mathbf{D}}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) := (\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|\underline{\mathbf{D}}|\alpha(\mathbf{R})) , \quad \underline{\boldsymbol{\mu}}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) := (\beta(\widetilde{\mathbf{R}})|\underline{\boldsymbol{\mu}}|\alpha(\mathbf{R})) , \quad (7.53)$$

so folgt für die geometrische Phase (7.47)

$$\gamma_\alpha(\mathcal{C}) = i \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{\mathcal{F}} \frac{\left( \underline{\mathbf{D}}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \cdot d\boldsymbol{\mathcal{E}} + \underline{\boldsymbol{\mu}}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \cdot d\boldsymbol{\mathcal{B}} \right) \wedge \left( \underline{\mathbf{D}}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) \cdot d\boldsymbol{\mathcal{E}} + \underline{\boldsymbol{\mu}}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) \cdot d\boldsymbol{\mathcal{B}} \right)}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2}. \quad (7.54)$$

Multiplizieren wir das Keilprodukt aus, so können wir die geometrische Phase in der Form

$$\gamma_\alpha(\mathcal{C}) = \int_{\mathcal{F}} \left( \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R}) + \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R}) + \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E},\mathcal{B})}(\mathbf{R}) \right) \quad (7.55)$$

schreiben, wobei die darin vorkommenden 2-Formen definiert sind als

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R}) &= i \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{(\underline{D}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{E}) \wedge (\underline{D}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{E})}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} \\
 &= i \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\underline{D}_{i,\alpha\beta}(\mathbf{R}) \underline{D}_{j,\beta\alpha}(\mathbf{R})}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} d\mathcal{E}_i \wedge d\mathcal{E}_j \\
 &= \frac{i}{2} \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\underline{D}_{i,\alpha\beta}(\mathbf{R}) \underline{D}_{j,\beta\alpha}(\mathbf{R}) - (i \leftrightarrow j)}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} d\mathcal{E}_i \wedge d\mathcal{E}_j ,
 \end{aligned} \tag{7.56}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R}) &= i \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{(\underline{\mu}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{B}) \wedge (\underline{\mu}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{B})}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} \\
 &= \frac{i}{2} \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\underline{\mu}_{i,\alpha\beta}(\mathbf{R}) \underline{\mu}_{j,\beta\alpha}(\mathbf{R}) - (i \leftrightarrow j)}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} d\mathcal{B}_i \wedge d\mathcal{B}_j
 \end{aligned} \tag{7.57}$$

und

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E},\mathcal{B})}(\mathbf{R}) &= i \sum_{\beta \neq \alpha} \left[ \frac{(\underline{D}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{E}) \wedge (\underline{\mu}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{B})}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{(\underline{D}_{\beta\alpha}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{E}) \wedge (\underline{\mu}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \cdot d\mathcal{B})}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} \right] \\
 &= i \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\underline{D}_{i,\alpha\beta}(\mathbf{R}) \underline{\mu}_{j,\beta\alpha}(\mathbf{R}) - \underline{\mu}_{j,\alpha\beta}(\mathbf{R}) \underline{D}_{i,\beta\alpha}(\mathbf{R})}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} d\mathcal{E}_i \wedge d\mathcal{B}_j .
 \end{aligned} \tag{7.58}$$

Die ersten beiden 2-Formen,  $\mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R})$  und  $\mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R})$ , sind das Produkt zweier antisymmetrischer Tensoren zweiter Stufe (mit Indizes  $i$  und  $j$ ), also vom Typ

$$\mathcal{I} = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} R_{ij} , \quad Q_{ij} = -Q_{ji} , \quad R_{ij} = -R_{ji} . \tag{7.59}$$

Wir können diese Antisymmetrie unter Verwendung des Levi-Civita-Tensors explizit machen, indem wir

$$Q_{ij} = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \tilde{Q}_k , \quad R_{ij} = \sum_{\ell=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \tilde{R}_\ell , \tag{7.60}$$

schreiben. Hiermit ergibt sich

$$\mathcal{I} = \sum_{i,j=1}^3 \sum_{k,\ell=1}^3 \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ij\ell} \tilde{Q}_k \tilde{R}_\ell = 2 \sum_{k,\ell=1}^3 \delta_{k\ell} \tilde{Q}_k \tilde{R}_\ell = 2 \tilde{\mathbf{Q}} \cdot \tilde{\mathbf{R}} . \tag{7.61}$$

Hierbei wurde die bekannte Relation  $\sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ij\ell} = 2\delta_{k\ell}$  verwendet. Die Komponenten  $\tilde{Q}_k$  und  $\tilde{R}_\ell$  berechnen sich ebenfalls mit Hilfe dieser Relation zu

$$\tilde{Q}_k = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ijk} Q_{ij} , \quad \tilde{R}_\ell = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} R_{ij} \quad (k, \ell = 1, 2, 3) . \quad (7.62)$$

Aus der antisymmetrischen 2-Form  $d\mathcal{E}_i \wedge d\mathcal{E}_j$  aus Gl. (7.56) können wir damit das gerichtete Flächenelement

$$df_\ell^{(\mathcal{E})} := \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} d\mathcal{E}_i \wedge d\mathcal{E}_j , \quad (\ell = 1, 2, 3) \quad (7.63)$$

bilden und analog dazu natürlich auch

$$df_\ell^{(\mathcal{B})} := \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} d\mathcal{B}_i \wedge d\mathcal{B}_j , \quad (\ell = 1, 2, 3) . \quad (7.64)$$

Aus den antisymmetrischen Tensorkomponenten in den eckigen Klammern von Gl. (7.56) und (7.57) können wir Vektorfelder

$$\mathcal{J}_{\alpha,\ell}^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R}) := \frac{i}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{D_{i,\alpha\beta}(\mathbf{R}) D_{j,\beta\alpha}(\mathbf{R}) - (i \leftrightarrow j)}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} \right) , \quad (\ell = 1, 2, 3) \quad (7.65)$$

und

$$\mathcal{J}_{\alpha,\ell}^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R}) := \frac{i}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\mu_{i,\alpha\beta}(\mathbf{R}) \mu_{j,\beta\alpha}(\mathbf{R}) - (i \leftrightarrow j)}{(E_\alpha(\mathbf{R}) - E_\beta(\mathbf{R}))^2} \right) , \quad (\ell = 1, 2, 3) \quad (7.66)$$

definieren und erhalten dann gemäß (7.61)

$$\mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R}) = \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{E})} , \quad \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R}) = \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{B})} . \quad (7.67)$$

Der Faktor zwei, der hier im Vergleich zu (7.61) fehlt, wurde bereits bei der Definition der  $\mathcal{J}_{\alpha,\ell}(\mathbf{R})$  berücksichtigt, wo wir den Faktor  $1/2$  aus (7.62) unterschlagen haben.

Wir können diese Rechnung leider nicht auf den Beitrag  $\mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E},\mathcal{B})}(\mathbf{R})$  aus Gl. (7.58) übertragen, da dieser Ausdruck aufgrund der gemischten 2-Form  $d\mathcal{E}_i \wedge d\mathcal{B}_j$  nicht als Produkt antisymmetrischer Tensoren geschrieben werden kann. Die geometrische Phase lautet mit den bisherigen Ergebnissen also

$$\gamma_\alpha(\mathcal{C}) = \int_{\mathcal{F}} \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{E})} + \int_{\mathcal{F}} \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{B})} + \int_{\mathcal{F}} \mathcal{I}_\alpha^{(\mathcal{E},\mathcal{B})}(\mathbf{R}) . \quad (7.68)$$



Besonders interessant an diesem Ergebnis sind die ersten beiden Beiträge. Hier haben wir offenbar zwei separate Integrale über Flächen im Raum der elektrischen bzw. magnetischen Feldstärke. Die Integranden sind dreidimensionale Vektorfelder, die wir als Flussdichten interpretieren können und die wir im folgenden kurz als geometrische Flussdichten bezeichnen wollen. Bei konstantem elektrischen (magnetischen) Feld ist die geometrische Phase also durch den Gesamtfluss durch die geschlossene Kurve  $\mathcal{C}$  im Raum der magnetischen (elektrischen) Feldstärke gegeben. Durch visuelle Darstellung der in (7.65) und (7.66) definierten Flussdichten können wir also einerseits zu einem tieferen Verständnis der zugrundeliegenden Physik kommen und darüberhinaus auch eine Entscheidung über die genaue Lage der geschlossenen Kurve  $\mathcal{C}$  im Parameterraum treffen. Diese Möglichkeit der Visualisierung ist besonders interessant im Hinblick auf die Aufspaltung der Flussdichten in einen P-erhaltenden und P-verletzenden Anteil, die wir im Folgenden untersuchen wollen. Beide Beiträge zur geometrischen Phase können dann separat untersucht werden.

Der gemischte Beitrag zur geometrischen Phase in Gl. (7.68) kann nicht auf diese Weise visualisiert werden. Hier kann man lediglich jeweils zwei Komponenten des elektrischen bzw. magnetischen Feldes als konstant betrachten und in der verbleibenden Fläche im Parameterraum den Integranden untersuchen.

### 7.3.3 Die P-erhaltenden und P-verletzenden geometrischen Flussdichten

Wir knüpfen nun an die Diskussion aus Abschnitt 7.3.1 an und betrachten die Massenmatrix

$$\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R}, \delta) = \underline{\mathcal{M}}(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta) = \underline{\mathcal{M}}_0 - \underline{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E} - \underline{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} + \delta \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}} \quad (7.69)$$

mit der symbolischen Schreibweise für den P-verletzenden Anteil. Die Eigenzustände der vollen Massenmatrix erfüllen die Gleichung

$$\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta) |\alpha(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta)\rangle = E_\alpha(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta) |\alpha(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta)\rangle. \quad (7.70)$$

Nun wollen wir den P-verletzenden Anteil der zuvor berechneten geometrischen Flussdichten separat behandeln und müssen dazu die Eigenzustände nach dem betragsmäßig kleinen Parameter  $\delta$  in eine Störungsreihe entwickeln. Wir verwenden dabei die Formeln aus Anhang A.3 und entwickeln nur bis zur ersten Ordnung in  $\delta$ . Wir erhalten dann

$$|\alpha(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta)\rangle = |\alpha^{(0)}(\mathbf{E}, \mathbf{B})\rangle + \delta |\alpha^{(1)}(\mathbf{E}, \mathbf{B})\rangle + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (7.71)$$

und analog

$$(\alpha(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \delta)| = (\alpha^{(0)}(\mathbf{E}, \mathbf{B})| + \delta (\alpha^{(1)}(\mathbf{E}, \mathbf{B})| + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (7.72)$$

sowie

$$E_\alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta) = E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \delta E_\alpha^{(1)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (7.73)$$

und mit Gl. (A.89) aus Anhang A.3 (für nichtentartete Zustände, siehe Voraussetzung (7.42))

$$|\alpha^{(1)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\rangle = \sum_{\gamma \neq \alpha} |\gamma^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\rangle \frac{\mathcal{M}_{\gamma\alpha}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_\gamma^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})} , \quad (7.74)$$

$$(\alpha^{(1)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})| = \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\mathcal{M}_{\alpha\gamma}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_\gamma^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})} (\gamma^{(0)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})| , \quad (7.75)$$

wobei hier und auch im weiteren Verlauf dieses Kapitels die Matrixelemente in der lokalen Basis immer bzgl. der ungestörten Zustände zu verstehen sind, also z.B.

$$\mathcal{M}_{\alpha\beta}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) := (\alpha^{(0)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})| \mathcal{M}_{\text{PV}} | \beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})) \quad (7.76)$$

und analog für  $\underline{D}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  und  $\underline{\mu}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$ . Die erste Ordnung der Störungsentwicklung für den Energieeigenwert lautet nach Gl. (A.75)

$$E_\alpha^{(1)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = (\alpha^{(0)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})| \mathcal{M}_{\text{PV}} | \alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})) = \mathcal{M}_{\alpha\alpha}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) . \quad (7.77)$$

In der Basis der Gesamtdrehimpulszustände  $|2L_J, F, F_3\rangle$  hat die Matrix  $\mathcal{M}_{\text{PV}}$  keine Diagonalelemente und die Korrekturen der Energie sind quadratisch in  $\delta$ . Für Felder mit einer gewissen Symmetrie unter Spiegelungen, kann man sogar allgemein zeigen, dass die Eigenenergien  $E_\alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta)$  nur von geraden Potenzen von  $\delta$  abhängen ([31], Abschnitt 3.4). Für allgemeine Felder wird dies jedoch nicht der Fall sein [33, 34]. In unserem Fall wird die Vernachlässigung der ersten Ordnung aufgrund der schwachen Felder und der Tatsache, dass wir hier lediglich quadratische Energiedifferenzen in den Nennern der geometrischen Flussdichten betrachten, dennoch eine sehr gute Näherung darstellen. Tatsächlich zeigt die numerische Berechnung der lokalen Matrixdarstellung, dass selbst bei wesentlich höheren Feldern als wir sie hier betrachten, nämlich bei  $\boldsymbol{\mathcal{B}} = \mathcal{O}(1 \text{ T})$  und  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = \mathcal{O}(100 \text{ V/m})$ , die Diagonalelemente der P-verletzenden Matrizen in der lokalen Darstellung immer noch viele Größenordnungen kleiner als die Nebendiagonalelemente sind. Wir setzen im Folgenden also stets

$$E_\alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta) \approx E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \quad (7.78)$$

voraus.

Um nun die geometrischen Flussdichten in P-erhaltenden Teil und P-verletzenden Teil aufspalten zu können, müssen wir alle lokalen Matrixelemente der Operatoren für das Dipolmoment und das magnetische Moment nach  $\delta$  entwickeln. Wir betrachten exemplarisch für beide Operatoren einen Vektoroperator  $\underline{\eta}$  und dessen Matrixelement

$$(\alpha(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta)| \underline{\eta}_i | \beta(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta)) = \underline{\eta}_{i,\alpha\beta}^{\text{PC}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \delta \underline{\eta}_{i,\alpha\beta}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \mathcal{O}(\delta^2) , \quad (i = 1, 2, 3) , \quad (7.79)$$

das wir in einen P-erhaltenden (Superskript PC für *parity conserving*) und einen P-verletzenden Anteil aufgespaltet haben. Mit der Entwicklung der Eigenzustände folgt

$$\underline{\eta}_{i,\alpha\beta}^{\text{PC}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \equiv \underline{\eta}_{i,\alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = (\alpha^{(0)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})|\underline{\eta}_i|\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})) \quad (7.80)$$

und

$$\begin{aligned} \underline{\eta}_{i,\alpha\beta}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) &= (\alpha^{(1)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})|\underline{\eta}_i|\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})) + (\alpha^{(0)}(\widetilde{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})|\underline{\eta}_i|\beta^{(1)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})) \\ &= \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\underline{\mathcal{M}}_{\alpha\gamma}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\underline{\eta}_{i,\gamma\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})} + \sum_{\gamma \neq \beta} \frac{\underline{\eta}_{i,\alpha\gamma}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\underline{\mathcal{M}}_{\gamma\beta}^{\text{PV}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})} . \end{aligned} \quad (7.81)$$

Wir haben hier bereits von der weiter oben getroffenen Vereinbarung Gebrauch gemacht, dass alle Matrixelemente, die in der Form  $\underline{\eta}_{\alpha\beta}$  geschrieben werden, ab sofort bzgl. der ungestörten, feldabhängigen Basiszuständen  $|\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\rangle$  zu verstehen sind. Dies gilt natürlich nicht für die Matrixelemente des letzten Abschnitt 7.3.2, die bzgl. der Eigenzustände  $|\alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta)\rangle$  der vollen Massenmatrix (7.69) zu verstehen sind. Nichtsdestotrotz sagt uns Gl. (7.80), dass zusammen mit der Vernachlässigung der P-verletzenden Beiträge zu den Energiedifferenzen die Ergebnisse des letzten Abschnitts formal übernommen werden können, um die P-erhaltenden geometrischen Flussdichten zu erhalten. Aus (7.65) und (7.66) folgt dann

$$\mathcal{J}_{\alpha,\ell}^{(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \frac{i}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{D}_{i,\alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\underline{D}_{j,\beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - (i \leftrightarrow j)}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \right) , \quad (7.82a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\alpha,\ell}^{(\boldsymbol{\mathcal{B}}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) &= \frac{i}{2} \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{\mu}_{i,\alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\underline{\mu}_{j,\beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - (i \leftrightarrow j)}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \right) , \quad (7.82b) \\ &(\ell = 1, 2, 3) . \end{aligned}$$

In Anhang A.5 haben wir gezeigt, dass die so definierten Flussdichten zu Recht als P-erhaltend bezeichnet werden können. Unter P-Transformation ändert sich das Vorzeichen des elektrischen Feldes  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ , während das magnetische Feld  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  in sich selbst übergeht. In Gl. (A.118) ist gezeigt, dass bei diesem Übergang die P-erhaltenden Flussdichten unverändert bleiben, d.h. es gilt

$$\mathcal{J}_{\alpha}^{(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \mathcal{J}_{\alpha}^{(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \text{PC})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) , \quad \mathcal{J}_{\alpha}^{(\boldsymbol{\mathcal{B}}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \mathcal{J}_{\alpha}^{(\boldsymbol{\mathcal{B}}, \text{PC})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) . \quad (7.83)$$

Um die P-verletzende Anteile zu berechnen, die in erster Ordnung in  $\delta$  zu den Flussdichten beitragen, müssen wir in den Matrixprodukten, die im Zähler der geometrischen Flussdichten stehen, formal jeweils ein Matrixelement durch das P-verletzende Matrixelement

aus Gl. (7.81) ersetzen. Wir erinnern uns außerdem daran, dass es zwei P-verletzende Beiträge zur Massenmatrix gab, jeweils proportional zu  $\delta_1$  und  $\delta_2$ . Also müssen wir zwei P-verletzende geometrische Flussdichten unterscheiden. Das Endergebnis lautet dann für  $\varkappa \in \{1, 2\}$  und  $\ell \in \{1, 2, 3\}$

$$\begin{aligned} & \mathcal{J}_{\varkappa, \alpha, \ell}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \\ &= \frac{i}{2} \sum_{i, j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\underline{D}_{i, \alpha\beta}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{j, \beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \underline{D}_{i, \alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{j, \beta\alpha}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})] - (i \leftrightarrow j)}{(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}))^2} \right), \end{aligned} \quad (7.84a)$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{J}_{\varkappa, \alpha, \ell}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \\ &= \frac{i}{2} \sum_{i, j=1}^3 \varepsilon_{ij\ell} \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\underline{\mu}_{i, \alpha\beta}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mu}_{j, \beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \underline{\mu}_{i, \alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mu}_{j, \beta\alpha}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})] - (i \leftrightarrow j)}{(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}))^2} \right). \end{aligned} \quad (7.84b)$$

wobei nach Gl. (7.81)

$$\underline{D}_{i, \alpha\beta}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}, \alpha\gamma}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{i, \gamma\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})} + \sum_{\gamma \neq \beta} \frac{\underline{D}_{i, \alpha\gamma}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}, \gamma\beta}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}, \quad (7.85a)$$

$$\underline{\mu}_{i, \alpha\beta}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}, \alpha\gamma}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mu}_{i, \gamma\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})} + \sum_{\gamma \neq \beta} \frac{\underline{\mu}_{i, \alpha\gamma}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}, \gamma\beta}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}, \quad (7.85b)$$

$$(\varkappa = 1, 2)$$

einzusetzen ist. Auch diese Flussdichten werden zu Recht als P-verletzend bezeichnet, denn wie in Gl. (A.120) in Anhang A.5 gezeigt ist, gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) &= -\mathcal{J}_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}), \quad \mathcal{J}_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = -\mathcal{J}_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}), \\ &(\varkappa = 1, 2). \end{aligned} \quad (7.86)$$

Die geometrischen Flussdichten (7.65) und (7.66) lauten damit insgesamt bis zur Ordnung

$\mathcal{O}(\delta)$

$$\mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{E})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta) = \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \delta_1 \mathcal{J}_{1,\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \delta_2 \mathcal{J}_{2,\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \mathcal{O}(\delta^2) , \quad (7.87a)$$

$$\mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{B})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}, \delta) = \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \delta_1 \mathcal{J}_{1,\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \delta_2 \mathcal{J}_{2,\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) + \mathcal{O}(\delta^2) . \quad (7.87b)$$

Eingesetzt in (7.68) ergeben sich nach der Integration über die Fläche hieraus die P-erhaltenden und P-verletzenden Beiträge zur geometrischen Phase. Für konstantes magnetisches Feld ist

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha(\mathcal{C}) &\xrightarrow{\boldsymbol{\mathcal{B}}=\text{const}} \gamma_\alpha^{(\mathcal{E})}(\mathcal{C}) = \gamma_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{C}) + \delta_1 \gamma_{1,\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{C}) + \delta_2 \gamma_{2,\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{C}) , \\ \gamma_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{C}) &= \int_{\mathcal{F}} \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{E})} , \\ \gamma_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{C}) &= \int_{\mathcal{F}} \mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{E})} , \quad (\varkappa = 1, 2) \end{aligned} \quad (7.88)$$

und analog folgt für konstantes elektrisches Feld

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha(\mathcal{C}) &\xrightarrow{\boldsymbol{\mathcal{E}}=\text{const}} \gamma_\alpha^{(\mathcal{B})}(\mathcal{C}) = \gamma_\alpha^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(\mathcal{C}) + \delta_1 \gamma_{1,\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\mathcal{C}) + \delta_2 \gamma_{2,\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\mathcal{C}) , \\ \gamma_\alpha^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(\mathcal{C}) &= \int_{\mathcal{F}} \mathcal{J}_\alpha^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{B})} , \\ \gamma_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\mathcal{C}) &= \int_{\mathcal{F}} \mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \cdot d\mathbf{f}^{(\mathcal{B})} , \quad (\varkappa = 1, 2) . \end{aligned} \quad (7.89)$$

Wie bereits am Ende des letzten Abschnitts erwähnt wird man in der Praxis die P-erhaltenden und P-verletzenden Flussdichten studieren, um einen geeigneten Integrationsweg  $\mathcal{C}$  im Parameterraum festzulegen. Die numerische Berechnung der geometrischen Phasen allerdings wird sich leichter durch die Verwendung der diagonalen Matrixelemente der Ortsableitungsmatrix bewerkstelligen lassen. Diese müssen zuvor ebenfalls in einen P-erhaltenden und P-verletzenden Anteil aufgespalten werden. Es folgt dann

$$\begin{aligned} (\alpha(\widetilde{Z}, \delta) | \partial_Z | \alpha(Z, \delta)) &= (\alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}(Z), \widetilde{\boldsymbol{\mathcal{B}}}(Z), \delta) | \partial_Z | \alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}(Z), \boldsymbol{\mathcal{B}}(Z), \delta)) \\ &= \underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z) + \delta_1 \underline{\mathcal{D}}_{1,\alpha\alpha}^{(1, \text{PV})}(Z) + \delta_2 \underline{\mathcal{D}}_{2,\alpha\alpha}^{(1, \text{PV})}(Z) \end{aligned} \quad (7.90)$$

mit dem ungestörten Matrixelement

$$\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z) = (\alpha(\widetilde{Z}) | \partial_Z | \alpha(Z)) \quad (7.91)$$

und den P-verletzenden Anteilen

$$\underline{\mathcal{D}}_{\varkappa,\alpha\alpha}^{(1,\text{PV})}(Z) = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV},\alpha\beta}^{(\varkappa)} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z) + \underline{\mathcal{D}}_{\alpha\beta}^{(1)}(Z) \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV},\beta\alpha}^{(\varkappa)}}{E_{\alpha}^{(0)}(Z) - E_{\beta}^{(0)}(Z)} . \quad (7.92)$$

Wir sind hier wieder zur Schreibweise mit der  $Z$ -Abhängigkeit übergegangen, da die Felder numerisch in Abhängigkeit von dieser Ortskoordinate vorliegen. Generell wird dann für jeden Ort  $Z$  das Eigenwertproblem (ohne P-Verletzung) mit den an diesem Ort geltenden Werten für die Felder numerisch gelöst und damit alle benötigten Ausdrücke berechnet, wie z.B. die lokalen Darstellungen der Matrizen  $\underline{\mathcal{D}}^{(1)}(Z)$ ,  $\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(1,2)}(Z)$ ,  $\underline{\mathbf{D}}(Z)$  und  $\underline{\boldsymbol{\mu}}(Z)$ . Unter Verwendung von (7.90) lautet also der numerisch zu berechnende Ausdruck für die geometrische Phase gemäß Gl. (7.30)

$$\gamma_{\alpha}(\mathcal{C}) = \gamma_{\alpha}^{\text{PC}}(\mathcal{C}) + \delta_1 \gamma_{1,\alpha}^{\text{PV}}(\mathcal{C}) + \delta_2 \gamma_{2,\alpha}^{\text{PV}}(\mathcal{C}) , \quad (7.93)$$

mit

$$\gamma_{\alpha}^{\text{PC}}(\mathcal{C}) = i \int_{Z_0}^Z dZ \underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(Z) , \quad (7.94a)$$

$$\gamma_{\varkappa,\alpha}^{\text{PV}}(\mathcal{C}) = i \int_{Z_0}^Z dZ \underline{\mathcal{D}}_{\varkappa,\alpha\alpha}^{(1,\text{PV})}(Z) , \quad (\varkappa = 1, 2) . \quad (7.94b)$$

### 7.3.4 Numerische Resultate

Wie bereits mehrfach erwähnt bietet es sich an, zunächst die geometrischen Flussdichten zu studieren und dann geeignete Kurven im Parameterraum zu wählen. Leider hat man bereits für metastabilen Wasserstoff eine überwältigende Menge an möglichen Flussdichten, die man analysieren könnte. Zu den vier metastabilen  $2S$ -Zuständen von Wasserstoff kann man jeweils eine P-erhaltende und eine P-verletzende Flussdichte berechnen und in Form eines dreidimensionalen Vektordiagramms darstellen. Alle Flussdichten sind komplexwertig, liefern also je einen Plot für den Realteil und einen weiteren für den Imaginärteil. Man muss außerdem stets die Flussdichten zu konstantem  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ -Feld und konstantem  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ -Feld unterscheiden. Zu jeder Variante kann man die Flussdichte im entsprechenden Raum der Feldstärken plotten, wobei jeder Wert des konstanten Feldes einen separaten Plot liefert. Um einen gewissen Bereich in beiden Feldstärken abzudecken, kann man also selbst bei großen Schrittweiten in den Feldstärken leicht auf eine Zahl von über 1000 Vektordiagrammen kommen.

Zum Glück ist die Situation nicht so tragisch, wie der letzte Absatz vermuten lässt. Durch die numerische Berechnung und Betrachtung verschiedener Vektordiagramme entsteht relativ schnell ein Eindruck von den zugrundeliegenden Gesetzmäßigkeiten, so dass man sich

letztendlich auf die exemplarische Betrachtung sehr weniger Plots beschränken kann. Wir wollen dabei anmerken, dass die zeitliche Dauer der numerischen Berechnung der Plots kein Problem darstellt: Mit einem handelsüblichen Rechner und einem in C++ geschriebenen Programm sind wir in der Lage, etwa 2000 Plots (mit je einigen 100 Vektoren) in etwa 15 Minuten zu berechnen.

Wir wollen in diesem Abschnitt diese Gesetzmäßigkeiten an einem anschaulichen Beispiel erklären und für ganz spezielle Integrationswege auch die numerisch berechneten Werte der geometrischen Phasen angeben, um ein Gefühl für die Größenordnung des P-verletzenden Effekts zu bekommen. Die numerische Untersuchung der P-verletzenden geometrischen Phasen mit den in diesem Kapitel aufgestellten Formeln steht gerade erst am Anfang und wird in der näheren Zukunft hoffentlich noch viele Früchte tragen. Wir werden im Ausblick in Abschnitt 8.2 genauer darauf eingehen, welche Aspekte in kommenden Arbeiten noch zu studieren sind.

Wir betrachten nun die geometrische Flussdichte des metastabilen Wasserstoffzustands mit Index  $\alpha = 9$ ,  $|9, \mathcal{E}, \mathcal{B}, \delta) := |2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}, \mathcal{B}, \delta)$  (siehe Anhang B.2.2, Tabelle B.15) bei konstantem Magnetfeld

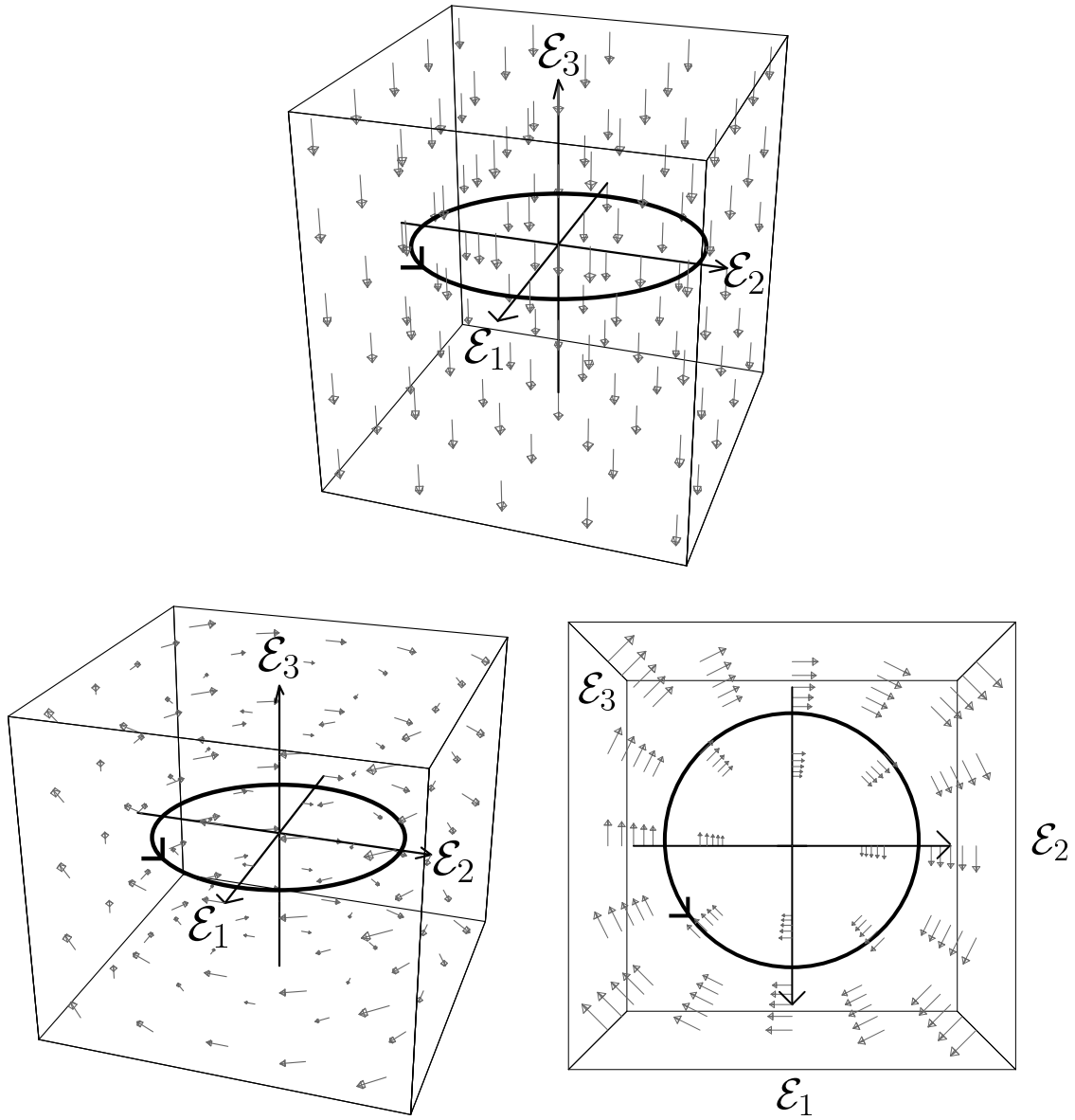
$$\mathcal{B} = (0, 0, 1 \text{ mT}) \quad (7.95)$$

im Raum der elektrischen Feldstärke  $\mathcal{E}$ . Wir wählen für die Berechnung der Vektordiagramme ein um  $\mathcal{E} = 0$  zentriertes Intervall  $\mathcal{E}_i \in [-10 \text{ V/cm}, 10 \text{ V/cm}]$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$  und verwenden die in Anhang B.2.2, Tabelle B.9 ff. dargestellten Matrixdarstellungen für die Operatoren des magnetischen Moments  $\underline{\mu}$  und des Dipolmoments  $\underline{D}$ . Wir beschränken uns auf die Darstellung der Realteile der P-erhaltenden und P-verletzenden Flussdichten, die sich qualitativ genauso wie die Imaginärteile verhalten. Weiterhin betrachten wir exemplarisch nur die zu  $\delta_1$  proportionalen, P-verletzenden Beiträge.

Betrachten wir zunächst den linken Plot in Abb. 7.1, in dem  $\text{Re } \mathcal{J}_9^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{E}, \mathcal{B})$  dargestellt ist. Offenbar orientiert sich die Ausrichtung aller Vektoren an der Ausrichtung des magnetischen Feldes. Der Einfluss des magnetischen Feldes auf die Eigenzustände ist viel größer als der Einfluss der sehr kleinen elektrischen Feldstärken, die wir hier betrachtet haben. Die Richtung des Magnetfelds kann also als ausgezeichnete Richtung bezeichnet werden und gibt somit die Quantisierungsachse vor. Wie klein die Auswirkung des elektrischen Feldes auf die Flussdichtevektoren ist, kann man schon darin erkennen, dass alle im Diagramm vorkommenden Vektoren scheinbar gleich sind<sup>5</sup>. Insbesondere sind die Flussdichtevektoren an zueinander P-transformierten Feldstärken identisch, wie in Anhang A.5, Gl. (A.118) gezeigt. Da das magnetische Feld invariant unter P-Transformation ist, kann

---

<sup>5</sup> Numerisch exakt identisch sind diese Vektoren i.A. jedoch nicht. Die Änderung der Beträge der Energieeigenwerte im Definitionsbereich von Abb. 7.1 ist um einige Größenordnung geringer als die Energiedifferenzen, die aufgrund des zugrunde liegenden Magnetfelds entstanden sind. In diesem Zusammenhang sei auch auf Anhang B.2.3 verwiesen, wo numerische Ergebnisse für die Energieeigenwerte von metastabilem Wasserstoff in elektrischen und magnetischen Feldern präsentiert werden.



**Abbildung 7.1:** Die Realteile der geometrischen Flussdichten des Zustands  $|9, \mathcal{E}, \mathcal{B}, \delta) := |2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}, \mathcal{B}, \delta)$  bei  $\mathcal{B} = (0, 0, 1 \text{ mT})$  im Raum der elektrischen Feldstärke,  $\mathcal{E}_i \in [-10 \text{ V/cm}, 10 \text{ V/cm}]$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ . Oben ist der P-erhaltende Teil  $\text{Re } \mathcal{J}_9^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{E}, \mathcal{B})$  dargestellt, unten der P-verletzende Anteil  $\text{Re } \mathcal{J}_{1,9}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{E}, \mathcal{B})$ , der zum Parameter  $\delta_1$  gehört.



man in Abb. 7.1 direkt die Vektoren an punktgespiegelten Koordinaten miteinander vergleichen.

Numerische Rechnungen zeigen, dass der P-erhaltende Anteil der geometrischen Phase, der sich unter Verwendung des im Diagramm eingezeichneten Integrationsweg  $\mathcal{C}$  ergibt, etwa

$$\gamma_9^{\text{PC}}(\mathcal{C}) = \mathcal{O}(10^{-3}) \quad (7.96)$$

ist. Berechnet man dagegen den P-verletzenden Anteil der geometrischen Phase mit diesem Pfad  $\mathcal{C}$ , so erhält man

$$\gamma_{1,9}^{\text{PV}}(\mathcal{C}) = 0 . \quad (7.97)$$

Dieses Ergebnis kann man verstehen, wenn man das mittlere und das rechte Diagramm in Abb. 7.1 betrachtet. Der Integrationsweg  $\mathcal{C}$  wurde von uns so gewählt, dass er ein optimales Ergebnis für die P-erhaltende Phase liefert<sup>6</sup>. Es zeigt sich jedoch, dass die P-verletzende Flussdichte gerade ein Wirbelfeld um die  $\mathcal{E}_3$ -Achse ist. Alle P-verletzenden Flussdichtevektoren liegen in der gleichen Ebene, wie der Integrationsweg, also gibt es auch keinen P-verletzenden Fluss durch die von  $\mathcal{C}$  eingeschlossene Fläche.

Wie bei der P-erhaltenden Flussdichte sind auch die Vektoren der P-verletzenden Flussdichte offenbar (aus demselben Grund, siehe Fußnote) betragsmäßig unabhängig vom elektrischen Feld im dargestellten Definitionsbereich. Die Richtung allerdings weist eine sehr starke Feldabhängigkeit auf. Sie drückt den P-verletzenden Charakter der Flussdichte aus, denn nach Gl. (A.120) aus Anhang A.5 folgt, dass die Vektoren der P-verletzenden Flussdichte an zueinander punktgespiegelten Koordinaten entgegengesetzt gleich sein müssen. Dies kann man in den beiden Diagrammen in Abb. 7.1 sehr gut erkennen.

Ein optimaler Integrationsweg für die P-verletzende Phase müsste also in einer Ebene liegen, die die  $\mathcal{E}_3$ -Achse enthält und dürfte die  $\mathcal{E}_3$ -Achse nicht überschreiten. Wählt man z.B. einen Weg mit  $\mathcal{E}_1 = 0$  und  $\mathcal{E}_2 > 0$  im hier verwendeten Bereich für die elektrischen Feldstärken, so erhält man P-verletzende, geometrische Phasen der Größenordnung

$$\gamma_{1,9}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{C}') = \mathcal{O}(10^{-4}\delta_1) . \quad (7.98)$$

Für den hier beschriebenen Weg  $\mathcal{C}'$ , der senkrecht zu  $\mathcal{C}$  liegt, verschwindet wie zu erwarten der P-erhaltende Anteil der geometrischen Phase,  $\gamma_9^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{C}')$ .

Wir wollen nun diskutieren, wie man mit den Relationen (A.118) und (A.120) für die P-transformierten geometrischen Flussdichten zeigen kann, dass die zugehörigen geometrischen Phasen ebenfalls P-erhaltend bzw. P-verletzend sind. Allgemein erhält man die P-transformierte geometrische Phase durch Integration über den P-transformierten Weg. Betrachtet man einen Integrationsweg im Raum der elektrischen Feldstärke bei konstantem Magnetfeld, so ergibt sich aufgrund der P-Invarianz des Magnetfelds z.B. das in Abb.

---

<sup>6</sup>Er ist senkrecht zu den Vektoren der P-erhaltenden Flussdichte.

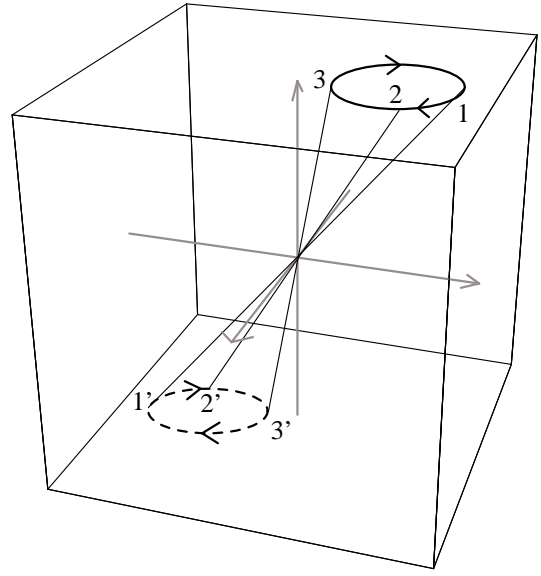
7.2 dargestellte Bild. Jede Koordinate des Integrationsweges muss punktgespiegelt werden, wodurch der gesamte Integrationsweg punktgespiegelt wird, der Umlaufsinn jedoch erhalten bleibt. Eine analoge Betrachtungsweise im Raum der magnetischen Feldstärken bei konstantem elektrischen Feld gilt nicht. In diesem Fall müsste man den gleichen Integrationsweg in einem anderen Diagramm für entgegengesetztes elektrisches Feld betrachten. Wir werden weiter unten erläutern, wie man sich aus diesem Dilemma befreien kann.

Bei der P-erhaltenden geometrischen Phase  $\gamma_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{C})$  hat man das Integral über die P-erhaltende Flussdichte zu bilden. Transformiert man den Integrationsweg, so integriert man also bei gleichem Umlaufsinn über die Flussdichte mit der gespiegelten elektrischen Feldstärke, der aber nach (A.118) identisch ist mit der Flussdichte an der ursprünglichen Stelle. Der P-erhaltende Anteil der geometrischen Phase bleibt also invariant<sup>7</sup> unter P-Transformation. Bei der P-verletzenden Phase tritt wegen Gl. (A.120) nach der P-Transformation der entgegengesetzt gleiche Fluss durch den P-transformierten Integrationsweg auf, also kehrt die P-verletzende geometrische Phase unter P-Transformation insgesamt ihr Vorzeichen um. Zusammenfassend gilt also

$$\gamma_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{C}) \xrightarrow{P} \gamma_\alpha^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\mathcal{C}) , \quad (7.99)$$

$$\gamma_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{C}) \xrightarrow{P} -\gamma_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\mathcal{C}) , \quad (7.100)$$

( $\varkappa = 1, 2$ ) .



**Abbildung 7.2:** Verhalten einer geschlossenen Kurve unter P-Transformation. Diese Betrachtung gilt für alle Koordinatensysteme, die unter P-Transformation ihr Vorzeichen wechseln, also z.B. für Ortskoordinaten oder die elektrische Feldstärke, nicht aber für magnetische Feldstärken.

Eine Idee, die man aufgrund der bisherigen Diskussion in zukünftigen Arbeit weiterverfolgen sollte, ist die Wahl eines Integrationsweges im Raum der elektrischen Feldstärken, der die Form einer Acht hat, wobei der Mittelpunkt bei  $\mathcal{E} = 0$  liegen sollte. Ein Beispiel für einen solchen Weg ist in Abb. 7.3 dargestellt. Der Integrationsweg muss dabei in einer Ebene liegen und die eine Schleife muss die Spiegelung der anderen Schleife am Ursprung sein (d.h. P-Transformation mit umgekehrtem Umlaufsinn). Nach den bisherigen Ergebnissen sollte für einen solchen Integrationsweg die P-erhaltende geometrische Phase stets verschwinden, während die P-verletzende geometrische Phase verdoppelt wird (sie ist identisch für jede Integrationsschleife). Durch die Verwendung dieser Art von Integrationswegen würde man eine rein P-verletzende geometrische Phase erhalten.

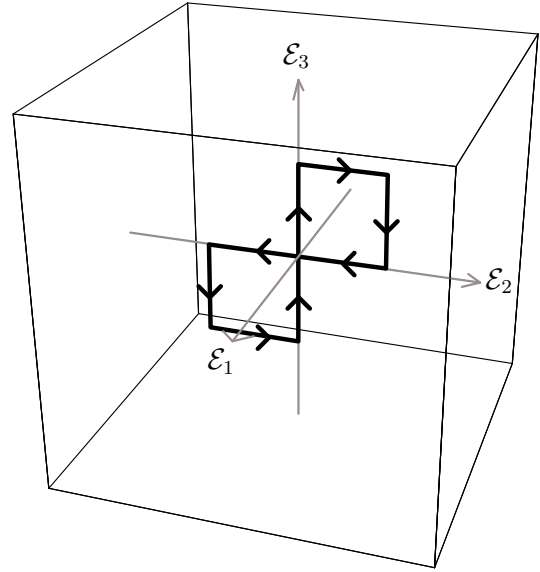
<sup>7</sup>Würde sich auch der Umlaufsinn des Integrationsweges unter P-Transformation umkehren, so wäre dadurch ein Vorzeichenwechsel entstanden.

Kommen wir nun zu dem zur bisher betrachteten Situation entgegengesetzten Fall und betrachten die geometrischen Phasen und Flussdichten für ein konstantes elektrisches Feld  $\mathcal{E}$  im Raum der magnetischen Feldstärke  $\mathcal{B}$ . Dies erfordert ein gewisses Umdenken im Vergleich zu dem bisher diskutierten Beispiel. Die Relationen aus (A.118) und (A.120) gelten für identisches  $\mathcal{B}$ -Feld, aber entgegengesetzt gleiches  $\mathcal{E}$ -Feld. Ginge man genauso vor, wie in diesem Abschnitt, so müsste man also stets identische Koordinaten in zwei separaten Vektordiagrammen im  $\mathcal{B}$ -Raum miteinander vergleichen, die für entgegengesetzte elektrische Felder berechnet wurden.

Wollte man eine Vergleichsmöglichkeit innerhalb eines Diagramms für konstantes elektrisches Feld und variabler magnetischer Feldstärke schaffen, so müsste man anstelle der P-Transformation Spiegelungen an einer Ebene betrachten, die  $\mathcal{E}$  enthält. Diese Spiegelung  $R$  kann dann als Kombination der Paritätstransformation und einer Rotation um die Normale  $\mathbf{n}$  der Spiegelungsebene um  $\pi$  darstellen. Der entsprechende Operator, der auf die inneren atomaren Zustände angewendet werden kann, lautet dann

$$R(\mathbf{n}) = e^{i\pi(\mathbf{F} \cdot \mathbf{n})} P, \quad (7.101)$$

wobei  $\mathbf{F}$  der Operator des Gesamtdrehimpulses ist, siehe Anhang A.2. Mit den Gesamtdrehimpulszuständen aus Anhang A.2 könnte man dann eine Matrixdarstellung  $\mathcal{R}$  des Spiegelungsoperators angeben und damit ähnliche Relationen wie in den Gleichungen (A.118) und (A.120) aufstellen. Eine weitere Schwierigkeit ist, dass auch die Zustände unter einer solchen Spiegelung im Allgemeinen in andere Zustände übergehen, da z.B. die dritten Komponenten  $F_3$  des Gesamtdrehimpulses sich unter Transformation i.A. ändern werden. Ist dies der Fall, so muss man wiederum zwei Vektordiagramme (je einen für jeden Zustand) miteinander vergleichen. Eine Möglichkeit, die Änderung des Zustands zu vermeiden, wäre eine Spiegelung, die die dritte Komponente des Magnetfelds invariant lässt. Es würden dann für konstantes elektrisches Feld  $\mathcal{E}$  die Flussdichten und geometrischen Phasen ein und desselben der zueinander gespiegelten Magnetfelder  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{B}' = R\mathcal{B}$  miteinander in Beziehung gesetzt. Anhand dieser Relationen könnte man innerhalb eines Vektordiagramms im Raum der magnetischen Feldstärke bei eingezeichneter Spiegelungsebene wieder optisch die Flussdichtevektoren miteinander vergleichen. Integrationswege in diesen Diagrammen wären dann zu vergleichen mit gespiegelten Integrationswegen, die jedoch (im Gegensatz zu P-transformierten Wegen) einen umgekehrten Umlaufsinn hätten.



**Abbildung 7.3:** Ein möglicher Integrationsweg für eine rein P-verletzende geometrische Phase.

Die von uns gezeigte Existenz P-verletzender geometrischer Phasen bestätigt die Ergebnisse aus der Dissertation [33], in der allerdings Atome in Ruhe in einem zeitabhängigen elektrischen Feld betrachtet wurden. Ein Vergleich der Resultate aus [33] mit numerischen Werten, die mit Hilfe der hier aufgestellten Formeln berechnet werden, ist eine interessante Aufgabe, die in zukünftigen Arbeiten behandelt werden muss.

Bei der Betrachtung der Gln. (7.96) und (7.98) fällt auf, dass zumindest bei den hier exemplarisch verwendeten Integrationspfaden der P-erhaltende Anteil und der P-verletzende Anteil der geometrischen Phase um viele Größenordnungen auseinanderliegen<sup>8</sup>. Hier muss man weitere Maßnahmen zur Vergrößerung des Effekts in Angriff nehmen. Neben einem modularen, periodischen Versuchsaufbau, bei dem die geometrische Phase einige tausend Mal aufgesammelt werden würde, wäre noch die Verwendung von beinahe entarteten Zuständen denkbar (z.B. durch ein noch kleineres, zugrundeliegendes Magnetfeld). Dann nämlich wird die in den Formeln dieses Kapitels überall auftretende Energiedifferenz im Nenner zu einer Vergrößerung der geometrischen Phasen führen. Eine weitere Idee wäre die Verwendung eines Versuchsaufbaus, der den P-erhaltenden Anteil der geometrischen Phase verschwinden lässt, nicht aber den P-verletzenden Anteil, was zu einer erhöhten Sensitivität auf die P-verletzende Phase führen würde.

---

<sup>8</sup>Man beachte, dass die P-verletzenden Parameter  $\delta_{1,2}$  Werte im Bereich von  $10^{-13} \dots 10^{-12}$  annehmen, siehe dazu auch [31] und [36].

---

# Kapitel 8

---

## Zusammenfassung und Ausblick

---

### 8.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir eine Theorie zur Beschreibung longitudinaler Atomstrahl-Spinecho-Experimente (IABSE, abgeleitet von *longitudinal Atomic Beam Spin Echo*) entwickelt. Bei solchen Experimenten durchquert ein Strahl neutraler Atome eine Anordnung elektrischer und magnetischer Felder. Ein wesentliches Merkmal der IABSE-Experimente ist das sogenannte Spinecho-Feld, das eine antiparallele Anordnung zweier hintereinandergeschalteter Magnetfelder in Strahlrichtung ist.

Die Atome sind anfangs in einer bestimmten Polarisierung präpariert, die quantenmechanisch als eine Superposition verschiedener atomarer Gesamtdrehimpulszustände dargestellt werden kann. Eine Beschreibung der Atome im Ortsraum gelingt durch die Zuordnung von Wellenpaketen zu den einzelnen atomaren Zuständen. Im ersten Magnetfeld spalten die Energieniveaus dieser Zustände auf unterschiedliche Weise auf, was zu einem Auseinanderdriften der zugeordneten Wellenpakete führt. Im zweiten, antiparallelen Magnetfeld werden die einzelnen Wellenpakete durch geschickte Wahl der Feldstärke wieder zum Überlapp gebracht, so dass man die Oszillation der relativen Phase in dem sogenannten Spinecho-Interferenzsignal mit einem geeigneten Detektor messen kann. Fügt man neben den Spinechofeldern weitere elektrische und magnetische Felder zum experimentellen Aufbau hinzu, so wird sich das Spinecho-Signal verändern. Hieraus kann man Rückschlüsse ziehen auf die physikalischen Prozesse im Atom, die beim Durchqueren der Feldanordnung stattgefunden haben.

In Kapitel 2 bis Kapitel 6 erarbeiteten wir uns Schritt für Schritt die vollständige Theorie zur Beschreibung dieser Art von Experimenten. Ausgehend von zwei sehr einfachen Ansätzen berechneten wir in Kapitel 2 zunächst Näherungslösungen der Schrödinger-Gleichung, deren unterschiedliche Eigenschaften wir diskutierten. Einige Anwendungen der WKB-Näherungslösung, die die besseren physikalischen Eigenschaften aufweist, folg-

ten dann in Kapitel 3. In Kapitel 4 entwickelten wir eine Methode zur Berechnung der Lösung der Schrödinger-Gleichung mit skalarem Potential in Form einer Reihenentwicklung. Diese Methode wendeten wir in Kapitel 5 zur Beschreibung eines Wellenpakets in einem komplexen, skalaren Potential an, in dem das durch das Wellenpaket repräsentierte Teilchen mit der Zeit zerfällt. In Kapitel 6 übertrugen wir dann den Formalismus auf den Fall nichthermitescher, matrixwertiger Potentiale, die zur Beschreibung metastabiler Atome notwendig sind. In Kapitel 7 wendeten wir die Ergebnisse aus Kapitel 6 auf die Untersuchung paritätsverletzender geometrischer Phasen an.

Wir wollen nun auf die einzelnen Schritte im Detail eingehen und die wesentlichen Ergebnisse festhalten. In Kapitel 2 wählten wir als Ansatz für die Lösung der Schrödinger-Gleichung ein Produkt aus Phasenfaktor und Amplitudenfunktion und vernachlässigten weiterhin alle zweiten Ortsableitungen von Phasenwinkel und Amplitudenfunktion. Legten wir den Phasenfaktor durch eine einfache, ebene Welle fest, so erhielten wir als Näherungslösung ein Wellenpaket mit potentialunabhängiger Schwerpunktsbewegung. Wählten wir hingegen den Phasenfaktor der WKB-Näherung, so ergab sich ein Wellenpaket mit einer im klassischen Sinne korrekten Schwerpunktsbewegung, bei der die erhaltene Gesamtenergie stets die Summe aus lokaler kinetischer und potentieller Energie war.

Mit dieser WKB-Näherungslösung konnten wir in Kapitel 3 bereits das sogenannte Fahrplanmodell im adiabatischen Grenzfall theoretisch reproduzieren und die zugehörigen Spinechosignale berechnen. Im Fahrplanmodell wird bei vorgegebener Feldkonfiguration der relative, zeitliche Abstand des Eintreffens der Schwerpunkte der atomaren Teilwellenpakete in Abhängigkeit von der Position auf der Strahlachse dargestellt. Dies ermöglicht die ungefähre Vorhersage der Lage von sogenannten Kreuzungspunkten, an denen sich jeweils zwei Wellenpakete maximal überlappen und die Oszillation der relativen Phase als Spinechosignal gemessen werden kann.

Motiviert von diesem Erfolg entwickelten wir in Kapitel 4 einen Formalismus zur Berechnung der exakten Lösung der skalaren Schrödinger-Gleichung in Form einer Reihenentwicklung nach einem Integraloperator  $\hat{K}$ . Die Anwendung des Formalismus basiert dabei stets auf dem Ansatz für die Wellenfunktion als Produkt eines Phasenfaktors und einer Amplitudenfunktion. Ausgehend vom WKB-Phasenfaktor berechnet man den Integraloperator  $\hat{K}$ , der die Entwicklung des Amplitudenanteils der Wellenfunktion bestimmt, wobei die nullte Ordnung dieser Entwicklung der aus Kapitel 2 bekannten WKB-Näherungslösung entsprach. Der Formalismus erlaubt dabei eine gewisse Freiheit bei der Wahl des Phasenfaktors, der neben dem WKB-Phasenwinkel noch weitere Beiträge enthalten kann. Hiervon hängt die Gestalt des Integraloperators  $\hat{K}$  und die Qualität der Entwicklung ab.

Die Entwicklung der Lösung der Schrödinger-Gleichung erlaubte uns in Abschnitt 4.3 einen quantitativen Vergleich der Näherungslösungen aus Kapitel 2 und darüberhinaus ein tieferes Verständnis der zugehörigen Korrekturen, die sich aus der Reihenentwicklung bis zur ersten Ordnung ergaben. Es stellte sich heraus, dass der Hauptbeitrag der Korrektur

---

der WKB-Näherungslösung aus der Vernachlässigung der Dispersion des Wellenpakets stammte. Um die Reihenentwicklung auch auf sehr schmale Wellenpakete mit ausgeprägter Dispersion anwenden zu können, entwickelten wir in Abschnitt 4.3.5 ein Verfahren, bei dem ein schmales Wellenpaket als Superposition sehr breiter Wellenpakete geschrieben wird, für die die Entwicklung bereits in erster Ordnung eine sehr gute Approximation der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung liefert.

Die Anwendung des Formalismus auf komplexe, skalare Potentiale in Kapitel 5 demonstrierte eindrucksvoll seine Fähigkeit zur Selbstkorrektur des Phasenwinkels. Ausgehend von einem einfachen Zusatz im WKB-Phasenwinkel, der den Zerfall des Wellenpakets beschreibt, berechneten wir die erste und die zweite Ordnung der Entwicklung der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung und konnten zwei Korrekturbeiträge zum Phasenwinkel identifizieren. Der eine Korrekturbeitrag ersetzte den zuvor angesetzten Zerfallsanteil gerade durch einen verbesserten Ausdruck, den wir in Abschnitt 5.2.2 auch sehr gut physikalisch interpretieren konnten. Der zweite Korrekturbeitrag konnte als Logarithmus einer Funktion geschrieben werden, die somit eine Korrektur der Amplitude des Wellenpakets darstellte. Wir haben gezeigt, dass diese Amplitudenkorrektur die Normierung des Wellenpakets bereits in nullter Ordnung der Entwicklung zu jeder Zeit sicherstellt (in reellen Potentialen ohne Zerfall des Wellenpakets).

In Kapitel 6 übertrugen wir den Formalismus zur Berechnung der Reihenentwicklung der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung mit dem in Kapitel 5 berechneten Phasenwinkel auf den Fall nichthermitescher, matrixwertiger Potentiale, die für die Beschreibung metastabiler Atome mit mehreren inneren Zuständen benötigt werden. Dabei sei angemerkt, dass der dort entwickelte Matrixformalismus leicht auf andere Fälle übertragen werden kann, bei denen ein stationäres Matrixpotential (hermitesch oder nichthermitesch) zugrundeliegt.

Im Gegensatz zum skalaren Fall erhielten wir in Kapitel 6 die Entwicklung der exakten Lösungen  $|\Psi(Z, t)\rangle$  nach Potenzen eines matrixwertigen Integraloperators  $\hat{\mathcal{K}}$ . Als Basis der Darstellung der Operatoren und des verallgemeinerten Spinors  $|\Psi(Z, t)\rangle$ , der das Atom insgesamt beschreibt, verwendeten wir die lokalen Eigenzustände  $|\alpha(Z)\rangle$  ( $\alpha = 1, \dots, N$ ) der Potentialmatrix  $\mathcal{M}(Z)$ .

Die nullte Ordnung der Entwicklung der Amplitudenfunktionen jeder Spinorkomponente von  $|\Psi(Z, t)\rangle$  nach Potenzen von  $\hat{\mathcal{K}}$  liefert den adiabatischen Grenzfall, bei dem die Wellenpakete der verschiedenen atomaren Zustände unabhängig voneinander durch individuelle Potentiale propagieren, die sich als Realteil der lokalen Eigenwerte der Potentialmatrix  $\mathcal{M}(Z)$  ergeben. Die adiabatischen Wellenpakete jeder Spinorkomponente sind dabei bis auf einen sehr wichtigen Zusatz zum Phasenwinkel identisch mit der WKB-Näherungslösung der skalaren Schrödinger-Gleichung. Der zusätzliche Beitrag im Phasenwinkel entspricht der geometrischen Phase, die der atomare Zustand, zu dem das Wellenpaket gehört, bei seinem Weg durch die Feldkonfiguration erhält. Da die Wellenpakete in der adiabatischen Näherung wie im skalaren Fall zunächst dispersionsfrei sind, bietet sich das

in Abschnitt 4.3.5 diskutierte Verfahren zur Berücksichtigung der Dispersion auch für die Lösung der matrixwertigen Schrödinger-Gleichung an.

In erster Ordnung der Entwicklung treten Mischungen der Zustände in den Lösungen der Amplitudenfunktionen jedes Teilwellenpakets auf. Diese sind proportional zu den nicht-diagonalen, lokalen Matrixelementen der in der Schrödinger-Gleichung enthaltenen Operatoren für die erste und zweite Ortsableitung. Bei Änderung der Massenmatrix  $\mathcal{M}(Z)$  mit dem Ort  $Z$ , ändert sich die Zusammensetzung ihrer Eigenzustände  $|\alpha(Z)\rangle$  und die Matrixelemente der Ableitungsoperatoren, z.B.  $(\widetilde{\beta(Z)}|\frac{d}{dZ}|\alpha(Z)\rangle)$  ( $\alpha, \beta = 1, \dots, N$ ) werden im Allgemeinen ungleich Null. Auf diese Weise können Wellenpakete von atomaren Zuständen entstehen, die nicht im Anfangszustand vertreten waren. Auch in der ersten Ordnung der Entwicklung der Lösung der matrixwertigen Lösung stellte der Dispersions-term den größten Korrekturbeitrag dar, weshalb insbesondere in diesem Fall Verfahren zur Berücksichtigung der Dispersion der Wellenpakete angewendet werden muss.

Eine genauere Betrachtung der ersten Ordnung der Entwicklung für matrixwertige Potentiale erlaubte uns die Einführung eines erweiterten Fahrplanmodells, das das adiabatische Fahrplanmodell um die grafische Darstellung der Bewegung neu entstandener Wellenpakete in den äußeren Felder erweitert. In diesem Zusammenhang haben wir in Abschnitt 6.3.2 verschiedene Möglichkeiten der Visualisierung diskutiert, dabei jedoch festgestellt, dass die Erweiterung des Fahrplanmodell nicht als exakte Methode zur Vorhersage der Lage von Kreuzungspunkten zu verstehen ist, sondern vielmehr als ein Werkzeug zur übersichtlichen Darstellung der wesentlichen bzw. interessierenden Prozesse beim IABSE angesehen werden sollte.

In Kapitel 7 haben wir die Verbindung zwischen der Theorie zur Beschreibung von IABSE-Experimenten und der Paritätsverletzung in Atomen am Beispiel der geometrischen Phasen hergestellt, die auch im adiabatischen Grenzfall auftreten können. Bewegt sich das Atom, während es die Feldanordnung durchquert, entlang einer geschlossenen Kurve in dem als Parameterraum bezeichneten sechsdimensionalen Raum der elektrischen und magnetischen Feldstärken, so können die atomaren Eigenzustände unter gewissen Umständen eine geometrische Phase erhalten.

Wir haben in Kapitel 7 am Beispiel des metastabilen Wasserstoffs mit Hauptquantenzahl  $n = 2$  gezeigt, wie diese geometrische Phase in einen P-erhaltenden und einen P-verletzenden Anteil aufgespalten werden kann. Weiterhin haben wir für den Fall, dass das magnetische (elektrische) Feld konstant ist, geometrische Flussdichten im Raum der elektrischen (magnetischen) Feldstärke definiert. Die geometrischen Phasen konnten dann als geometrischer Gesamtfluss durch eine vorgegebene geschlossene Kurve im Raum der elektrischen (magnetischen) Feldstärke interpretiert werden. Darüberhinaus erleichtert die grafische Darstellung der Flussdichten in einem dreidimensionalen Vektordiagramm die Wahl einer Integrationskurve zur Berechnung der geometrischen Phasen.

Anhand der grafischen Darstellung der numerisch berechneten P-erhaltenden und P-



verletzenden geometrischen Flussdichten in einem speziellen Fall konnten wir den P-erhaltenden bzw. P-verletzenden Charakter der Flussdichten veranschaulichen. Wir haben dazu die geometrischen Flussdichten eines bestimmten metastabilen Zustands von Wasserstoff im Raum der elektrischen Feldstärke bei konstantem Magnetfeld betrachtet. Anhand dieses Beispiels haben wir ferner das Verhalten der Integrationswege unter P-Transformation diskutiert, sowie die daraus im Zusammenhang mit dem Verhalten der Flussdichten folgenden Transformationseigenschaften der geometrischen Phasen. Schließlich konnten wir aus diesem Beispiel direkt die Existenz einer P-verletzenden geometrischen Phase für einen bestimmten Integrationsweg zeigen. Wir konnten darüberhinaus einen Vorschlag für einen geeigneten Typ von Integrationswegen machen, die die Form einer Acht im Parameterraum haben und eine rein P-verletzende geometrische Phase liefern.

Wir haben schließlich festgestellt, dass eine Betrachtung der Flussdichten für konstantes elektrisches Feld im Raum der magnetischen Feldstärken ein gewisses Umdenken erfordert, da die P-Transformation die elektrische Feldstärke umkehrt, das Magnetfeld aber invariant lässt. Will man P-transformierte Flussdichten, Integrationswege und geometrische Phasen miteinander vergleichen, muss man in diesem Fall also je zwei Vektordiagramme betrachten. Als Alternative haben wir die Verwendung von Spiegelungen vorgeschlagen, die als Produkt der P-Transformation und einer geeigneten Drehung dargestellt werden können.

Viele interessante Fragen ergeben sich aus unseren bisherigen Überlegungen und motivieren vertiefende und weiterführende Studien. Wir wollen einige davon im nun folgenden Abschnitt präsentieren.

## 8.2 Ausblick

Die in [36] diskutierten P-verletzenden und P-erhaltenden Polarisationsrotationen von Deuterium in elektrischen Feldern sind interessante Anwendungen des in dieser Arbeit aufgestellten Formalismus. In diesem Zusammenhang ist ein vertiefendes Studium der numerischen Methoden zur Berechnung der ersten Ordnung des Matrixformalismus unerlässlich, auch in Verbindung mit der in Abschnitt 4.3.5 diskutierten Methode zur Berücksichtigung der Dispersion der Wellenpakete. Hier kann der erweiterte Fahrplan zur Anwendung kommen. Die in [36] behandelten P-erhaltenden Polarisationsrotationen von Deuterium, die einen wesentlichen größeren Effekt als die P-verletzenden Drehungen darstellen, können als Test einer IABSE-Apparatur dienen und einen Vergleich von Theorie und Experiment ermöglichen. Hierauf aufbauend bietet sich eine Untersuchung der P-verletzenden Polarisationsrotationen von Wasserstoff in elektrischen Feldern mit der in [31] vorgeschlagenen Vorgehensweise zur resonanten Verstärkung an.

Ein tiefergehendes Studium der P-verletzenden geometrischen Phasen ist ein weiteres,

---

interessantes und vielversprechendes Gebiet. Die Betrachtung periodischer Feldkonfigurationen, bei denen die geometrischen Phasen im Idealfall viele tausend mal addiert werden, ist für die Untersuchung P-verletzender geometrischer Phasen unerlässlich. Die Untersuchung der geometrischen Flussdichten muss auf den Fall konstanter elektrischer und variabler magnetischer Feldstärken ausgedehnt werden. Hier stößt man auch auf Entartungen der Zustände, die mit den in dieser Arbeit entwickelten Methoden nicht behandelt werden können. In diesem Zusammenhang muss man die sogenannten nichtabelschen, geometrischen Phasen studieren, die völlig neue Aspekte in Bezug auf die P-Verletzung in Atomen bringen könnten. Die hier betrachteten, abelschen geometrischen Phasen müssen allerdings eingehender in der Nähe von Punkten im Parameterraum betrachtet werden, an denen Entartungen auftreten. Durch das Auftreten der Energiedifferenzen in den Nennern der Formeln für die Berechnung der geometrischen Phasen ist hier eine Verstärkung der P-verletzenden Beiträge zu erwarten.

Eine Untersuchung der geometrischen Phasen bei sowohl variabler elektrischer als auch magnetischer Feldstärke steht noch aus. Eine Definition geometrischer Flussdichten ist in diesem Fall zwar nicht mehr möglich, jedoch kann man zweidimensionale Ebenen im Parameterraum betrachten, bei denen jeweils eine Komponente des elektrischen und magnetischen Feldes variiert wird.

Die Verstärkung P-verletzender Effekte bei fast entarteten Zuständen wurde in einem anderen Zusammenhang bereits in [35] ausgenutzt, wo die sogenannten Floquet-Eigenwerte (siehe z.B. [47]) eines vereinfachten, zeitlich periodischen, zweidimensionalen Hamiltonoperators für atomares Dysprosium betrachtet wurden. Eine Übertragung auf die in dieser Arbeit untersuchten geometrischen Phasen ist ein weiteres interessantes Projekt.

Die in dieser Arbeit entwickelte Theorie hat also das Potential, viele interessante Methoden zur Messung P-verletzender Effekte im Rahmen eines IABSE-Experiments theoretisch zu untersuchen. Die enge Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. D. Dubbers und PD M. DeKieviet, PhD., die das Atomstrahl-Spinocho-Experiment betreuen, bietet darüberhinaus ein ideales Umfeld für zielgerichtete, theoretische Untersuchung mit der Hoffnung auf einen experimentellen Nachweis P-verletzender Effekte in leichten Atomen in den nächsten Jahren. Wir wollen uns dafür an dieser Stelle herzlich bedanken.

---

# Anhang A

---

## Quantenmechanische Grundlagen

---

In diesem Anhang wollen wir die quantenmechanischen Grundlagen zur Beschreibung metastabiler Atome erarbeiten. Hierzu gehört zunächst eine Behandlung des Zerfalls der inneren atomaren Zustände im Rahmen der Wigner-Weisskopf-Methode. Danach studieren wir die quantenmechanische Behandlung des Zwei-Teilchen-Problems, um die Propagation eines wasserstoffähnlichen Atoms, das aus einem Kern und einem Elektron besteht, richtig beschreiben zu können. Im darauf folgenden Abschnitt stellen wir die Störungsrechnung mit nichthermiteschen Massenmatrizen vor, was uns in Abschnitt A.4 die Berechnung der Ableitungsmatrizen  $\underline{\mathcal{D}}^{(1,2)}(z)$  aus Kapitel 6 erlaubt. Im letzten Abschnitt A.5 geben wir einige nützliche Relationen im Zusammenhang mit der Paritätstransformation an, die wir in Kapitel 7 benötigen.

Für die Notation vereinbaren wir hier, wie in der gesamten, vorliegenden Arbeit, dass Matrizen generell mit einem Unterstrich gekennzeichnet (z.B.  $\underline{\mathcal{M}}$ ) werden. Innere atomare Zustände schreiben wir als Ket-/Bra-Vektoren mit runden Klammern (z.B.  $|\alpha\rangle$ ). Den verallgemeinerten Spinor  $|\Psi(z, t)\rangle$  der Gesamtwellenfunktion eines Atoms und andere Zustände schreiben wir wie gewohnt mit spitzen Klammern.

### A.1 Die Wigner-Weisskopf-Methode

In diesem Abschnitt wollen wir lediglich eine Zusammenfassung der von V. Weisskopf und F. Wigner entwickelten Methode [43] geben. Eine (gegenüber der Originalarbeit [43] zeitgemäßere) Herleitung der im folgenden aufgeführten Ergebnisse findet sich in [44], Anhang I, wo die Methode auf den Zerfall von Kaonen angewendet wurde.

Allgemein kommt die Wigner-Weisskopf-Methode dann zur Anwendung, wenn ein quantenmechanisches System aus einer diskreten Menge von Zuständen in ein Kontinuum von Zuständen zerfällt. Betrachten wir metastabile Atome mit Hauptquantenzahl  $n = 2$  und

Kernspin  $I$ , dann wollen wir mit  $N_I$  die daraus resultierende Zahl von atomaren Zuständen  $|2, \alpha\rangle$  in diesem ( $n = 2$ )-Unterraum bezeichnen. Dabei ist  $\alpha$  ein geeignet gewählter Index zur Durchnummerierung der Zustände. Die Zustände  $|2, \alpha\rangle$  sind diskret und seien weiterhin nichtentartet.

Das metastabile Atom, das zu Anfang als Superposition der  $|2, \alpha\rangle$  beschrieben werden kann, wird nun mit der Zeit unter Aussendung von Photonen in Zustände aus dem ( $n = 1$ )-Unterraum  $|1, \beta\rangle$  zerfallen. Wir erhalten also mit der Zeit eine Beimischung von Produktzuständen

$$|1, \beta; \gamma, k\rangle \equiv |1, \beta\rangle \otimes |\gamma, k\rangle, \quad (\text{A.1})$$

wobei die  $|\gamma, k\rangle$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$  eine geeignete Basis des Fock-Raums der Photonen darstellen. Der Fock-Raum der Photonen ist dabei kontinuierlich, da Photonen beliebiger Impulse darin enthalten sind, womit die Menge der Produktzustände insgesamt auch kontinuierlich ist, so dass die Voraussetzung für die Anwendung der Wigner-Weisskopf-Methode gegeben sind<sup>1</sup>.

Insgesamt wollen wir die zeitliche Entwicklung des gesamten atomaren Zustands  $|t\rangle$  durch Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$H|t\rangle = i \frac{d}{dt} |t\rangle \quad (\text{A.2})$$

gewinnen. Der Zustand  $|t\rangle$  lässt sich dabei schreiben als ein verallgemeinerter Spinor

$$|t\rangle = \begin{pmatrix} \Psi(t) \\ \Phi_1(t) \\ \Phi_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

mit den Komponenten-Spinoren

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \langle 2, 1|t\rangle \\ \langle 2, 2|t\rangle \\ \langle 2, 3|t\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \Phi_k(t) = \begin{pmatrix} \langle 1, 1; \gamma, k|t\rangle \\ \langle 1, 2; \gamma, k|t\rangle \\ \langle 1, 3; \gamma, k|t\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

---

<sup>1</sup>Natürlich sind die atomaren Energieniveaus in der Theorie durch scharf definierte Energiedifferenzen voneinander getrennt, aber durch die endliche Lebensdauer der angeregten Zustände tritt eine gewisse Unschärfe der Energiedifferenzen auf, so dass die ausgesendeten Photonen ein kontinuierliches Spektrum aufweisen.

---

Wie man sieht, lebt der Spinor  $\Psi(t)$  im  $(n = 2)$ -Unterraum der atomaren Zustände und der Spinor  $\Phi(t) = (\Phi_k(t))$  im Produkt-Raum der  $(n = 1)$ -Zustände mit dem Unterraum aller Photon-Zustände  $|\gamma, k\rangle$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$

Den Hamilton-Operator

$$H = \hat{H} + H_{\text{rad}} \quad (\text{A.5})$$

zerlegen wir nun in einen stabilen Anteil  $\hat{H}$  und einen kleinen, störenden Anteil  $H_{\text{rad}}$ , der für den radiativen Zerfall verantwortlich ist. Wir vernachlässigen hier Übergänge aufgrund von  $H_{\text{rad}}$  zwischen Zuständen mit gleicher Hauptquantenzahl  $n$ . Da die Energiedifferenzen im Vergleich zu  $(n = 1)$ -Zuständen sehr gering sind, haben solche Übergänge sehr große Lebensdauern. Die relevanten Matrixelemente von  $H_{\text{rad}}$  bezeichnen wir mit

$$\underline{\mathcal{H}}_k := (\langle 1, \beta; \gamma, k | H_{\text{rad}} | 2, \alpha \rangle) \quad (\text{A.6})$$

Im stabilen Anteil  $\hat{H}$  des Hamiltonoperators befinden sich Beiträge des Coulomb-Potentials des Kerns, in dem das Elektron sich befindet, sowie Beiträge der schwachen Wechselwirkung und der äußeren elektrischen und magnetischen Felder. Wir werden auf diese Beiträge an anderer Stelle noch genauer eingehen. Hier wollen wir nur festhalten, dass wir Mischungen zwischen Zuständen verschiedener Hauptquantenzahlen aufgrund des Anteils  $\hat{H}$  des Hamiltonoperators vernachlässigen.

Wählen wir den Anfangszustand so, dass er nur Komponenten im  $(n = 2)$ -Unterraum besitzt, d.h.

$$|t = 0\rangle = \begin{pmatrix} \Psi(0) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

so liefert die Wigner-Weisskopf-Methode die Zeitentwicklung des verallgemeinerten Spinors im  $(n = 2)$ -Unterraum,

$$\Psi(t) = e^{-i\underline{\mathcal{M}}t} \Psi(0), \quad (t \geq 0). \quad (\text{A.8})$$

Dabei ist  $\underline{\mathcal{M}}$  die sogenannte nichthermitesche Massenmatrix, die in einen hermiteschen Anteil  $\underline{E}$  und einen antihermiteschen Anteil  $-\frac{i}{2}\underline{\Gamma}$  zerlegt werden kann, wobei

$$\underline{\mathcal{M}} = \underline{E} - \frac{i}{2}\underline{\Gamma}, \quad (\text{A.9})$$

$$\underline{E} = ((2, \alpha | \hat{H} | 2, \alpha')) \quad (\text{A.10})$$

$$\underline{\Gamma} = 2\pi \sum_k \underline{\mathcal{H}}_k^\dagger \delta(E_1 + E_{\gamma,k} - E_2) \underline{\mathcal{H}}_k. \quad (\text{A.11})$$

Die so definierten, hermiteschen Matrizen  $\underline{E}$  und  $\underline{\Gamma}$  leben im Unterraum der  $(n = 2)$ -Zustände. In der Diracschen Delta-Funktion sind  $E_{1,2}$  jeweils die Energie-Schwerpunkte der Zustände mit den Hauptquantenzahlen  $n = 1, 2$ .

An Gl. (A.8) erkennt man, dass die nichthermitesche Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}$  wie ein zeitunabhängiger Hamiltonoperator im stabilen Fall wirkt, d.h. die Lösung (A.8) entspricht der Lösung einer matrixwertigen Schrödinger-Gleichung

$$\underline{\mathcal{M}}\Psi(t) = i\frac{d}{dt}\Psi(t) . \quad (\text{A.12})$$

Dass  $\underline{\mathcal{M}}$  nichthermitesch ist, zieht einige Besonderheiten nach sich. Zunächst stellen wir fest, dass  $\underline{\mathcal{M}}$  nur im  $(n = 2)$ -Unterraum lebt. Dort hat man die Eigenwertgleichung

$$\underline{\mathcal{M}}|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle \quad (\text{A.13})$$

mit komplexen Energie-Eigenwerten

$$E_\alpha = V_\alpha - \frac{i}{2}\Gamma_\alpha . \quad (\text{A.14})$$

Der Realteil  $V_\alpha$  entspricht der Energie des Zustand  $|\alpha\rangle$  (wir verzichten im folgenden auf die Angabe der Hauptquantenzahl bei der Dirac-Notation, da wir uns von nun an stets auf den  $(n = 2)$ -Unterraum beziehen, solange es nicht explizit anders erwähnt wird). Der Anteil  $\Gamma_\alpha$  im Imaginärteil des Eigenwerts muss positiv sein und führt dann nach Gl. (A.8) zu einem exponentiellen Abklingen des Beitrags des atomaren Zustands  $|\alpha\rangle$  im Gesamtspinor  $\Psi(t)$ .

Die Nichthermitizität von  $\underline{\mathcal{M}}$  macht die Einführung von linken Eigenvektoren notwendig, die wir mit einer zusätzlichen Tilde kennzeichnen und die die Eigenwertgleichung

$$(\tilde{\alpha}|\underline{\mathcal{M}} = (\tilde{\alpha}|E_\alpha \quad (\text{A.15})$$

mit den gleichen Eigenwerten  $E_\alpha$  wie in Gl. (A.13) erfüllen. Für die linken Ket-Vektoren gilt dann eine Eigenwertgleichung mit komplex konjugierten Eigenwerten und hermitesch konjugierter Massenmatrix:

$$\underline{\mathcal{M}}^\dagger|\tilde{\alpha}\rangle = E_\alpha^*|\tilde{\alpha}\rangle . \quad (\text{A.16})$$

Gehen wir davon aus, dass wir bei einem äußeren (elektrischen oder magnetischen) Feld die 3-Achse in stets in Feldrichtung wählen können, so kann man die Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}$  gleichzeitig mit der Matrix der dritten Komponente des Gesamtdrehimpulses  $\underline{F}_3$  diagonalisieren. Man erhält dann gemeinsame linke und rechte Eigenzustände und es gilt

$$[\underline{\mathcal{M}}, \underline{F}_3] = 0 \quad (\text{A.17})$$

und

$$\underline{\mathcal{M}}|\alpha, F_3\rangle = E_{\alpha, F_3}|\alpha, F_3\rangle, \quad (\text{A.18a})$$

$$\underline{F}_3|\alpha, F_3\rangle = F_3|\alpha, F_3\rangle, \quad (\text{A.18b})$$

$$(\alpha, \widetilde{F}_3|\underline{\mathcal{M}} = (\alpha, \widetilde{F}_3|E_{\alpha, F_3}, \quad (\text{A.18c})$$

$$(\alpha, \widetilde{F}_3|\underline{F}_3 = (\alpha, \widetilde{F}_3|F_3. \quad (\text{A.18d})$$

Sind die Energieeigenwerte weiterhin nichtentartet im Unterraum zu festem  $F_3$ , d.h. gilt

$$E_{\alpha', F_3} \neq E_{\alpha, F_3} \quad (\alpha' \neq \alpha), \quad (\text{A.19})$$

dann bilden die in (A.18) definierten Zustände eine Basis des  $(n = 2)$ -Unterraum, d.h. wir können die Orthonormierung

$$(\alpha', \widetilde{F}_3|\alpha, F_3) = \delta_{\alpha', \alpha} \delta_{F_3', F_3} \quad (\text{A.20})$$

wählen, die sich als günstig für die Definition von Quasiprojektoren

$$\underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3} = |\alpha, F_3\rangle(\alpha, \widetilde{F}_3| \quad (\text{A.21a})$$

$$\underline{\mathbb{P}}_{\alpha', F_3'} \underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3} = \delta_{\alpha', \alpha} \delta_{F_3', F_3} \underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3} \quad (\text{A.21b})$$

$$\text{Sp}(\underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3}) = 1 \quad (\text{A.21c})$$

$$\sum_{\alpha, F_3} \underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3} = \underline{\mathbb{1}} \quad (\text{A.21d})$$

erweist. Darüberhinaus ist es für die Normierung von Erwartungswerten angebracht, zusätzlich die Normierung der rechten Eigenvektoren zu fordern, d.h.

$$(\alpha, F_3|\alpha, F_3) = 1. \quad (\text{A.22})$$

Mit den Quasiprojektoren kann man wegen (A.21d) die Matrixdarstellungen  $\underline{\mathcal{M}}$  und  $\underline{F}_3$  mit den Eigenwerten umschreiben in

$$\underline{\mathcal{M}} = \sum_{\alpha, F_3} E_{\alpha, F_3} \underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3}, \quad (\text{A.23})$$

$$\underline{F}_3 = \sum_{\alpha, F_3} F_3 \underline{\mathbb{P}}_{\alpha, F_3}. \quad (\text{A.24})$$

## A.2 Quantenmechanik des Zwei-Teilchen-Problems

In diesem Abschnitt wollen wir die Grundlagen zur Beschreibung eines wasserstoffähnlichen Atoms als Produktzustand von atomaren Zuständen und Wellenpaketen im Ortsraum erarbeiten. Wir betrachten das Atom als Zwei-Teilchen-System, d.h. wir betrachten den Atomkern als punktförmiges, geladenes Teilchen mit Kernspin  $I$ .

Wir beginnen mit möglichst allgemeinen Voraussetzungen und werden gegen Ende des Abschnitts ein wenig spezieller. Der Hamiltonoperator kann unter Verwendung der (zunächst dreidimensionalen) Schwerpunktskoordinate  $\mathbf{R}$  und der Relativkoordinate (des Elektrons)  $\mathbf{r}$  allgemein geschrieben werden als

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{ext}} + H_{\text{int}} + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\ &= \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{R}) + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{int}}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) . \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Dabei sei  $\mathbf{P}$  der Schwerpunktsimpuls,  $M$  die Gesamtmasse,  $\mathbf{p}$  der Relativimpuls und  $m$  die reduzierte Masse des Elektrons.  $V_{\text{ext}}(\mathbf{R})$  sei ein auf das Atom als ganzes wirkendes Potential,  $V_{\text{int}}$  sei der Operator für die Wechselwirkung zwischen Elektron und Atomkern und  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  sei ein Potential, das Schwerpunkts- und Relativbewegung miteinander verknüpft<sup>2</sup>.

Zunächst denken wir uns das Problem der Relativbewegung gelöst, d.h. es sei unter Verwendung von  $\mathbf{p} = \frac{1}{i} \nabla_{\mathbf{r}}$

$$H_{\text{int}} \varphi_j(\mathbf{r}) = \left( -\frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_{\text{int}}(\mathbf{r}) \right) \varphi_j(\mathbf{r}) = E_j^{(0)}(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) , \quad (j = 1, \dots, N) . \quad (\text{A.26})$$

Die  $\varphi_j(\mathbf{r})$  könnten z.B. die Wasserstoff-Wellenfunktionen  $\psi_{n,L,L_3}(\mathbf{r})$  sein, die mit dem Index  $j$  geeignet durchnummeriert seien. Wir wollen uns im folgenden nur auf den diskreten Teil des Spektrums beschränken und die Streulösungen, die ein kontinuierliches Eigenwertspektrum aufweisen, aus der Diskussion ausklammern.

An dieser Stelle bietet sich als Einschub eine Diskussion über innere atomare Eigenzustände an. Eine genauere Betrachtung des Atoms beinhaltet nämlich auch die Einbeziehung der Spin-Bahn-Kopplung (Feinstruktur) sowie der Wechselwirkung der magnetischen Momente des Elektrons und der Atomkerns (Hyperfeinstruktur). In diesem Fall genügt aber eine Bezeichnung der Zustände mit den Quantenzahlen  $n, L, L_3$  nicht mehr, sondern die inneren atomaren Zustände sind dann Linearkombinationen der Gesamtdrehimpulszustände  $|nL_J, S, I, F, F_3\rangle$ , in denen Kernspin  $\mathbf{I}$  und Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$  des Elektrons zum Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$  gekoppelt sind. Der Gesamtdrehimpuls des Elektrons seinerseits ist die Summe aus Bahndrehimpuls und Spin, d.h.  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . Die Zustände  $|nL_J, S, I, F, F_3\rangle$  sind dann Eigenzustände der Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, \mathbf{I}^2, \mathbf{F}^2$  und  $F_3 = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{F}$ . Da Elektronspin und Kernspin feste Größen für jedes Atom sind, lassen wir die zugehörigen Quantenzahlen in der Dirac-Schreibweise weg, d.h. wir haben

$$|nL_J, F, F_3\rangle = \begin{array}{l} \text{Gesamtdrehimpulszustände von Kernspin, Bahndrehimpuls} \\ \text{und Spin des Elektrons.} \end{array} \quad (\text{A.27})$$

Wie bereits erwähnt sind die inneren atomaren Zustände i.A. Linearkombinationen der eben eingeführten reinen Gesamtdrehimpulszustände, da z.B. die Hyperfeinstruktur zu

---

<sup>2</sup>Ein Beispiel hierfür wäre das Potential des elektrischen Dipolmoments  $\mathbf{D} = -e\mathbf{r}$  des Atoms in einem von  $\mathbf{R}$  abhängigen, äußeren elektrischen Feld  $\mathcal{E}(\mathbf{R})$ , also  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\mathbf{D} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{R})$

---



einer Mischung von Zuständen verschiedener Elektrongesamtdrehimpulse  $J$  führt. Diese inneren atomaren Zustände wollen wir mit einem zusätzlichen Hut über der Quantenzahl  $L$  kennzeichnen und mit einer runden, statt einer spitzen Klammer schreiben, d.h.

$$|n\hat{L}_J, F, F_3\rangle = \text{innerer, atomarer Zustand im feldfreien Fall.} \quad (\text{A.28})$$

Wenn möglich, kürzen wir die Gesamtdrehimpulszustände und die inneren atomaren, feldfreien Zustände durch die Schreibweisen  $|j\rangle$  und  $|j\rangle$ ,  $j = 1, \dots, N$ , ab. Dabei ist  $j$  einfach ein Index, der alle möglichen Zustände geeignet durchnummeriert. Oft verwenden wir auch den Index  $\alpha$  anstelle von  $j$  in den inneren Zuständen  $|\alpha\rangle$ , um den Unterschied in der Kurzschreibweise noch deutlicher zu machen. Zum Abschluss dieses kurzen Einschubs wollen wir noch anmerken, dass die inneren atomaren Zustände bei vorhanden äußeren Feldern in der Form

$$|n\hat{L}_J, F, F_3, \boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}\rangle = \text{innerer atomarer Zustand im elektromagnetischen Feld ,} \quad (\text{A.29})$$

bzw. kurz als  $|\alpha, \boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}\rangle$  oder, um die Ortsabhängigkeit zu verdeutlichen, als  $|\alpha(\mathbf{R})\rangle$  geschrieben werden. Wir wollen betonen, dass für allgemeine äußere Felder  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  und  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  die in der Notation auftretenden Symbole  $L$ ,  $J$ ,  $F$  und  $F_3$  keine guten Quantenzahlen mehr sein müssen. Die Notation ist so zu verstehen, dass der Zustand  $|n\hat{L}_J, F, F_3, \boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}\rangle$  adiabatisch aus dem atomaren Zustand  $|n\hat{L}_J, F, F_3\rangle$  für verschwindende äußere Felder entsteht. Wir wollen weiterhin vereinbaren, dass diese adiabatische Änderung stets entlang einer geraden Verbindungslinie der beiden Punkte  $(\boldsymbol{\mathcal{E}} = 0, \boldsymbol{\mathcal{B}} = 0)$  und  $(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  stattfindet.

Nun zurück zur Diskussion des Zwei-Teilchen-Problems. Die Eigenfunktionen  $\varphi_j(\mathbf{r})$  aus Gl. (A.26) seien orthonormiert, d.h. es gelte

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r \varphi_{j'}^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) = \delta_{j',j} . \quad (\text{A.30})$$

Eine Vollständigkeitsrelation gilt für die diskreten Lösungen und die Kontinuumslösungen, die wir mit einem kontinuierlichen Index  $a$  bezeichnen wollen. Sie lautet dann

$$\sum_j \varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}) + \int_a da \varphi_a^*(\mathbf{r}') \varphi_a(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) . \quad (\text{A.31})$$

Die Gesamtwellenfunktion des Hamiltonoperators (A.25) erfüllt die Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) . \quad (\text{A.32})$$

Betrachten wir nur gebundene Lösungen des Hamiltonoperators können wir mit der Vollständigkeitsrelation (A.31) die Gesamtwellenfunktion als Superposition der gebundenen Lösungen  $\varphi_j(\mathbf{r})$  mit diskretem Index  $j$  schreiben, d.h.

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \sum_j \psi_j(\mathbf{R}, t) \varphi_j(\mathbf{r}) \quad (\text{A.33})$$

mit

$$\begin{aligned}\psi_j(\mathbf{R}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \, \varphi_j^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) , \\ \psi_a(\mathbf{R}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \, \varphi_a^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{für alle } a) .\end{aligned}\tag{A.34}$$

Stellen wir die inneren Eigenfunktionen  $\varphi_j(\mathbf{r})$  bzw. ihre Ket-Vektoren als Vektoren dar, so können wir aus den Schwerpunktsanteilen  $\psi_j(\mathbf{R}, t)$  einen verallgemeinerten Spinor

$$|\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle = (\psi_j(\mathbf{R}, t)) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{R}, t) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{R}, t) \end{pmatrix}\tag{A.35}$$

bilden. Wir wollen nun zu einer matrixwertigen Schrödinger-Gleichung für den verallgemeinerten Spinor (A.35) gelangen. Dazu schreiben wir zunächst die Gesamtwellenfunktion in der Schrödinger-Gleichung (A.32) in der Form (A.33) und erhalten mit der Eigenwertgleichung (A.26)

$$\begin{aligned}H\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) &= \sum_j \left( -\frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{R}) + E_j^{(0)} + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \right) \psi_j(\mathbf{R}, t) \varphi_j(\mathbf{r}) \\ &= \sum_j \varphi_j(\mathbf{r}) \left( i \frac{\partial}{\partial t} \psi_j(\mathbf{R}, t) \right) .\end{aligned}\tag{A.36}$$

Nun projizieren wir von links auf die Eigenfunktion  $\varphi_k^*(\mathbf{r})$  und erhalten

$$\sum_j \left[ \left( -\frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{R}) + E_j^{(0)} \right) \delta_{k,j} + \underline{V}_{kj}(\mathbf{R}) \right] \psi_j(\mathbf{R}, t) = \sum_j \delta_{k,j} i \frac{\partial}{\partial t} \psi_j(\mathbf{R}, t)\tag{A.37}$$

mit der Matrix

$$\underline{V}(\mathbf{R}) = \left( \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \, \varphi_k^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \varphi_j(\mathbf{r}) \right) .\tag{A.38}$$

Definieren wir noch die Matrizen

$$\underline{E}_0 = (\delta_{k,j} E_j^{(0)}) ,\tag{A.39}$$

$$\underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{R}) \underline{\mathbb{1}} + \underline{V}(\mathbf{R}) ,\tag{A.40}$$

so gelangen wir zu einer Schrödinger-Gleichung für den in (A.35) definierten, verallgemeinerten Spinor  $|\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle$ :

$$\left( -\frac{1}{2M} \nabla^2 + \underline{E}_0 + \underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R}) \right) |\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle . \quad (\text{A.41})$$

Der Vollständigkeit halber sollte am Laplace-Operator noch eine Einheitsmatrix im  $(N \times N)$ -dimensionalen Raum der inneren atomaren Zustände stehen, also  $\nabla^2 \equiv \underline{\mathbb{1}} \nabla^2$ . Es versteht sich weiterhin von selbst, dass der Laplace-Operator nur auf die Schwerpunkts-Koordinate  $\mathbf{R}$  wirkt.

Die in (A.27) eingeführten Gesamtdrehimpulszustände  $|j\rangle$  bieten sich als Basis für die Darstellung aller Matrizen an. Man beachte, dass die Matrix  $\underline{E}_0$  zwar diagonal in der Basis der freien inneren atomaren Zustände  $|\alpha\rangle$  diagonal ist, i.A. aber nichtdiagonal in der Gesamtdrehimpulsbasis  $|j\rangle$ . Die Verwendung der Gesamtdrehimpulsbasis bietet sich aber schon allein aufgrund der Möglichkeit der Zerlegung in elementare Drehimpulseigenzustände unter Verwendung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten an. Wir werden dies bei der expliziten Berechnung der Massenmatrizen in Kapitel B sehen.

Wir führen nun die lokalen Eigenzustände

$$|\alpha(\mathbf{R})\rangle = \sum_j c_{\alpha,j}(\mathbf{R}) |j\rangle \quad (\text{A.42})$$

der Potentialmatrix

$$\underline{V}(\mathbf{R}) = \underline{E}_0 + \underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R}) \quad (\text{A.43})$$

aus der Schrödinger-Gleichung (A.41) ein. Im Falle eines metastabilen Atoms kommt zum freien Anteil  $\underline{E}_0$  die Matrix  $-\frac{i}{2}\underline{\Gamma}$  der Zerfallsraten hinzu und die Potentialmatrix  $\underline{V}(\mathbf{R})$  geht über in die nichthermitesche Massenmatrix

$$\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R}) = \underline{V}(\mathbf{R}) - \frac{i}{2}\underline{\Gamma} . \quad (\text{A.44})$$

In diesem Fall muss man - wie in Abschnitt A.1 diskutiert - rechte und linke Eigenvektoren von  $\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R})$  unterscheiden und man erhält für die linken Bra-Vektoren die zu (A.42) analoge Zerlegung

$$\langle \widetilde{\alpha(\mathbf{R})} | = \sum_j \tilde{c}_{\alpha,j}^*(\mathbf{R}) \langle j | \quad (\text{A.45})$$

mit i.A. von den  $c_{\alpha,j}(\mathbf{R})$  verschiedenen Koeffizienten  $\tilde{c}_{\alpha,j}(\mathbf{R})$ .

Im Moment wollen wir uns jedoch der Einfachheit halber auf stabile Atome beschränken und haben dann an jedem Ort  $\mathbf{R}$  die Eigenwertgleichung

$$\underline{V}(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})\rangle = V_\alpha(\mathbf{R})|\alpha(\mathbf{R})\rangle , \quad (\alpha = 1, \dots, N) , \quad (\text{A.46})$$

die wir als gelöst ansehen wollen. Wir gehen davon aus, dass keine Entartungen in den Eigenwerten auftreten. Für den Zustand des Atoms können wir dann den Ansatz

$$|\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{R}, t) |\alpha(\mathbf{R})\rangle = \sum_{\alpha, j} \Psi_{\alpha}(\mathbf{R}, t) c_{\alpha, j}(\mathbf{R}) |j\rangle \quad (\text{A.47})$$

machen. Die ursprünglichen Wellenpakete  $\psi_j(\mathbf{R}, t)$  in der Darstellung der Gesamtdrehimpulszustände sind jetzt Linearkombination der Wellenpakete  $\Psi_{\alpha}(\mathbf{R}, t)$  in der neuen, lokalen Basis von Eigenzuständen. Es gilt nach Projektion auf den Zustand  $|j\rangle$

$$\psi_j(\mathbf{R}, t) = \langle j | \Psi(\mathbf{R}, t) \rangle = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{R}, t) c_{\alpha, j}(\mathbf{R}) . \quad (\text{A.48})$$

Setzen wir nun den Zustand  $|\Psi(\mathbf{R}, t)\rangle$  in der lokalen Darstellung (A.47) in die Schrödinger-Gleichung (A.32) ein, so folgt

$$\sum_{\alpha} \left( -\frac{1}{2M} \nabla^2 + V_{\alpha}(\mathbf{R}) \right) \Psi_{\alpha}(\mathbf{R}, t) |\alpha(\mathbf{R})\rangle = \sum_{\alpha} i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\alpha}(\mathbf{R}, t) |\alpha(\mathbf{R})\rangle . \quad (\text{A.49})$$

Nehmen wir nun an, es gäbe keine äußeren Potentiale, dann hängen die Zustände  $|\alpha(\mathbf{R})\rangle$  nicht mehr von  $\mathbf{R}$  ab und es folgt nach Projektion auf einen Zustand  $|\beta\rangle$

$$\left( -\frac{1}{2M} \nabla^2 + V_{\beta} \right) \Psi_{\beta}(\mathbf{R}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\beta}(\mathbf{R}, t) . \quad (\text{A.50})$$

Die Lösungen dieser Schrödinger-Gleichung sind einfach die ebenen Wellen, die zu einem Wellenpaket superponiert werden können, d.h.

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{R}, t) = \int d^3k \tilde{\Psi}_{\beta}(\mathbf{k}) \exp \left\{ -i \left( \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + V_{\beta} \right) t + i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R} \right\} . \quad (\text{A.51})$$

Jede ebene Welle hat dabei eine Gesamtenergie

$$E_{\beta}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + V_{\beta} , \quad (\text{A.52})$$

die die Summe aus kinetischer Energie  $\mathbf{k}^2/2M$  und innerer Energie  $V_{\beta}$  des (freien) atomaren Zustands  $|\beta\rangle$  ist.

Die in diesem Abschnitt erarbeiteten Ergebnisse stellen die Grundlage zur Betrachtung der metastabilen Atome mit mehreren inneren Zuständen in matrixwertigen Potentialen in Kapitel 6 dar.

### A.3 Störungsrechnung für nichthermitesche Massenmatrizen

Wir übertragen den Formalismus der Störungsrechnung auf den Fall nichthermitescher Massenmatrizen. Dazu gehen wir aus von einer Matrix

$$\underline{\mathcal{M}}(\lambda) = \underline{\mathcal{M}}_0 + \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 , \quad (\text{A.53})$$

wobei  $\underline{\mathcal{M}}_0$  und  $\underline{\mathcal{M}}_1$  beide nichthermitesch sein können und  $\lambda$  ein reeller Parameter ist. Wir nehmen an, dass das Eigenwertproblem für  $\underline{\mathcal{M}}_0$  gelöst sei und die Eigenwerte nicht entartet sind<sup>3</sup>, d.h. es gelte

$$E_\alpha^0 \neq E_\beta^0 \quad \text{für} \quad \alpha \neq \beta \quad (\text{A.54})$$

und

$$\underline{\mathcal{M}}_0 |\alpha^0\rangle = E_\alpha^0 |\alpha^0\rangle, \quad (\tilde{\alpha}^0 | \underline{\mathcal{M}}_0 = (\tilde{\alpha}^0 | E_\alpha^0 \quad (\text{A.55})$$

mit den ungestörten rechten Eigenvektoren  $|\alpha^0\rangle$  und linken Eigenvektoren  $|\tilde{\alpha}^0\rangle$ . Wie bereits in Anhang A.1 erklärt, können wir für die linken und rechten Eigenvektoren die Orthonormalitätsrelation

$$(\tilde{\alpha}^0 | \beta^0) = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{A.56})$$

mit  $1 \leq \alpha, \beta \leq N$  fordern und damit Quasiprojektoren

$$\underline{\mathbb{P}}_\alpha^0 := |\alpha^0\rangle(\tilde{\alpha}^0| , \quad (\alpha = 1, \dots, N) , \quad (\text{A.57})$$

definieren, die die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \sum_\alpha \underline{\mathbb{P}}_\alpha^0 &= \mathbb{1} , \\ \underline{\mathbb{P}}_\alpha^0 \underline{\mathbb{P}}_\beta^0 &= \underline{\mathbb{P}}_\alpha^0 \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

besitzen. Die Eigenwerte von  $\underline{\mathcal{M}}(\lambda)$  berechnen sich aus der charakteristischen Gleichung

$$\det [\underline{\mathcal{M}}(\lambda) - E \cdot \mathbb{1}] = 0 . \quad (\text{A.59})$$

Für genügend kleine  $\lambda$  können wir auch die gestörten Eigenwerte als nicht entartet annehmen:

$$E_\alpha(\lambda) \neq E_\beta(\lambda) \quad \text{für} \quad \alpha \neq \beta . \quad (\text{A.60})$$

---

<sup>3</sup>Diese Annahme wird uns auch in den folgenden Abschnitten begleiten, sowie in Kapitel 7, wo wir viele der im Folgenden erhaltenen Ergebnisse anwenden.

Dies impliziert (siehe [31]) die Existenz von linken und rechten Eigenvektoren und von Quasiprojektoren für die gestörte Matrix  $\mathcal{M}(\lambda)$ :

$$|\alpha(\lambda)\rangle, \quad \langle \widetilde{\alpha(\lambda)}|, \quad \mathbb{P}_\alpha(\lambda) . \quad (\text{A.61})$$

In [31], Anhang C, wurde weiter gezeigt, dass die in (A.61) dargestellten Größen differenzierbar nach  $\lambda$  (in einer geeigneten Umgebung von Null) sind. Es zeigt sich, dass die korrekt normierten Eigenvektoren gegeben sind als

$$\begin{aligned} |\alpha(\lambda)\rangle &= \mathbb{P}_\alpha(\lambda) |\alpha^0\rangle , \\ \langle \widetilde{\alpha(\lambda)}| &= [\text{Sp}(\mathbb{P}_\alpha(\lambda) \mathbb{P}_\alpha(0))]^{-1} \langle \widetilde{\alpha^0}| \mathbb{P}_\alpha(\lambda) . \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

Wir wollen nun die Störungsentwicklung der Quasiprojektoren und somit der Zustände berechnen und gehen dabei wie im Falle hermitescher Matrizen vor, wobei die Methode aus [39], Kap. 16.3, verwendet wird. Wir definieren die Resolvente

$$G_0(w) := \frac{1}{w - \mathcal{M}_0} , \quad (w \in \mathbb{C}) , \quad (\text{A.63})$$

die man wegen

$$G_0(w) \mathbb{P}_\alpha^0 = \frac{\mathbb{P}_\alpha^0}{w - E_\alpha^0} \quad (\text{A.64})$$

und (A.57) schreiben kann als

$$G_0(w) = \sum_\alpha \frac{\mathbb{P}_\alpha^0}{w - E_\alpha^0} . \quad (\text{A.65})$$

Der Quasiprojektor  $\mathbb{P}_\alpha^0$  ist also das Residuum des einfachen Poles von  $G_0(w)$  an der Stelle  $E_\alpha^0$  und kann daher mit der Cauchyschen Integralformel geschrieben werden als

$$\mathbb{P}_\alpha^0 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_\alpha} G_0(w) dw , \quad (\text{A.66})$$

wobei  $C_\alpha$  ein in der komplexen Ebene geschlossener Weg sei, der entgegen dem Uhrzeigersinn läuft und ausschließlich die Singularität bei  $E_\alpha^0$  einschließt. Da wir für hinreichend kleine  $\lambda$  die Eigenwerte  $E_\alpha(\lambda)$  ebenfalls als diskret und nicht entartet annehmen können, gilt die analoge Relation für den gestörten Quasiprojektor  $\mathbb{P}_\alpha(\lambda)$ :

$$\mathbb{P}_\alpha(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_\alpha} G(w) dw , \quad (\text{A.67})$$

mit

$$G(w) := \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0 - \lambda \underline{\mathcal{M}}_1} . \quad (\text{A.68})$$

Wir entwickeln nun die Resolvente  $G(w)$  nach  $\lambda$ . Es gilt

$$\begin{aligned} G(w) &= \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0 - \lambda \underline{\mathcal{M}}_1} = \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0} [(w - \underline{\mathcal{M}}_0 - \lambda \underline{\mathcal{M}}_1) + \lambda \underline{\mathcal{M}}_1] \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0 - \lambda \underline{\mathcal{M}}_1} \\ &= \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0} + \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0} \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 \frac{1}{w - \underline{\mathcal{M}}_0 - \lambda \underline{\mathcal{M}}_1} \\ &= G_0(w) [1 + \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 G(w)] . \end{aligned}$$

Durch iteratives Einsetzen von  $G(w)$  ergibt sich

$$G(w) = \sum_{n=0}^{\infty} G_0(w) [\lambda \underline{\mathcal{M}}_1 G_0(w)]^n = \sum_{n=0}^{\infty} (w - \underline{\mathcal{M}}_0)^{-1} [\lambda \underline{\mathcal{M}}_1 (w - \underline{\mathcal{M}}_0)^{-1}]^n \quad (\text{A.69})$$

und durch Einschieben der Vollständigkeitsrelation (A.57) für die ungestörten Quasiprojektoren erhalten wir weiter

$$G(w) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \sum_{\beta} \frac{\mathbb{P}_{\beta}^0}{w - E_{\beta}^0} \left[ \sum_{\gamma} \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 \frac{\mathbb{P}_{\gamma}^0}{w - E_{\gamma}^0} \right]^n \right\} . \quad (\text{A.70})$$

Nun berechnen wir aus (A.67) die Störungsentwicklung des Quasiprojektors  $\mathbb{P}_{\alpha}(\lambda)$ . Bis zur zweiten Ordnung in  $\lambda$  haben wir mit (A.70):

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{\alpha}(\lambda) &= \sum_{\beta} \mathbb{P}_{\beta}^0 \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\alpha}} \frac{1}{w - E_{\beta}^0} dw + \sum_{\beta, \gamma} \mathbb{P}_{\beta}^0 \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 \mathbb{P}_{\gamma}^0 \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\alpha}} \frac{1}{(w - E_{\beta}^0)(w - E_{\gamma}^0)} dw \\ &\quad + \sum_{\beta, \gamma, \kappa} \mathbb{P}_{\beta}^0 \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 \mathbb{P}_{\gamma}^0 \lambda \underline{\mathcal{M}}_1 \mathbb{P}_{\kappa}^0 \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\alpha}} \frac{1}{(w - E_{\beta}^0)(w - E_{\gamma}^0)(w - E_{\kappa}^0)} dw + \mathcal{O}(\lambda^3) \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

Zur Berechnung der Integrale verwendet man die Residuenformel (siehe z.B. Theorem 6.3 in [48]), die in unserem Fall in der Form

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\alpha}} f(w) dw &= \text{Res}(f(w); E_{\alpha}^0) , \\ \text{Res}(f(w); E_{\alpha}^0) &= \frac{[(\partial_w)^{k-1} (w - E_{\alpha}^0)^k f(w)]}{(k-1)!} \Big|_{w=E_{\alpha}^0} \end{aligned} \quad (\text{A.72})$$

geschrieben werden kann, wobei  $f(w)$  jeweils aus den Integralen in (A.71) zu übernehmen ist und angenommen wurde, dass der Faktor  $(w - E_{\alpha}^0)^{-1}$  in der  $k$ -ten Potenz vorkommt,

d.h.  $f(w)$  einen Pol  $k$ -ter Ordnung in  $E_\alpha^0$  aufweist. In der Ordnung  $\lambda^0$  erhalten wir also den ungestörten Quasiprojektor  $\mathbb{P}_\alpha^0$ , da  $C_\alpha$  ja nur die Singularität bei  $E_\alpha^0$  einschließen soll. Bei höheren Ordnungen muss man, je nachdem wieviele der Summationsindizes  $\beta, \gamma, \kappa, \dots$  gleich  $\alpha$  sind, das Residuum des Poles bei  $E_\alpha^0$  mit (A.72) berechnen. Sind alle Indizes gleich  $\alpha$ , so ergibt das Integral also gerade Null.

Bis zur zweiten Ordnung in  $\lambda$  ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_\alpha(\lambda) &= \mathbb{P}_\alpha^0 + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0]}{E_\alpha^0 - E_\beta^0} \\ &+ \sum_{\beta, \gamma \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\gamma^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\gamma^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 + \mathbb{P}_\gamma^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0]}{(E_\alpha^0 - E_\gamma^0)(E_\alpha^0 - E_\beta^0)} \\ &- \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 + \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0]}{(E_\alpha^0 - E_\beta^0)^2} \\ &+ \mathcal{O}(\lambda^3) \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

Die beiden letzten Summen gehören dabei zur Ordnung  $\lambda^2$ . Die Norm berechnet sich dann zu

$$\text{Sp}[\mathbb{P}_\alpha(\lambda) \mathbb{P}_\alpha^0] = 1 - \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{(E_\alpha^0 - E_\beta^0)^2} \text{Sp}[\lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0] + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (\text{A.74})$$

Mit den letzten beiden Gleichungen und zusammen mit (A.62) können wir die Entwicklung der linken und rechten Eigenvektoren bei gegebener Matrix  $\mathcal{M}(\lambda)$  durchführen. Die Entwicklung der Eigenwerte erhält man aus der Gleichung für den Erwartungswert der Matrix  $\mathcal{M}(\lambda)$ :

$$\begin{aligned} E_\alpha(\lambda) &= \text{Sp}[\mathcal{M}(\lambda) \mathbb{P}_\alpha(\lambda)] = \text{Sp}[(\mathcal{M}_0 + \lambda \mathcal{M}_1) \mathbb{P}_\alpha(\lambda)] \\ &= E_\alpha^0 + \text{Sp}[\lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0] + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{E_\alpha^0 - E_\beta^0} \text{Sp}[\lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0] + \mathcal{O}(\lambda^3) \end{aligned} \quad (\text{A.75})$$

## A.4 Störungstheoretische Berechnung der Ableitungsmatrizen

In diesem Kapitel wollen wir (eindimensional) ortsabhängige Matrizen und Eigenvektoren betrachten, d.h. es soll

$$\mathcal{M}(z)|\alpha(z)\rangle = E_\alpha(z)|\alpha(z)\rangle \quad (\text{A.76})$$



für alle Orte  $z \in \mathbb{R}$  gelten. Wir interessieren uns nun für die Eigenwertgleichung an einem infinitesimal benachbarten Ort  $z' = z + \delta z$ . Auch dort muss die Eigenwertgleichung

$$\underline{\mathcal{M}}(z + \delta z)|\alpha(z + \delta z)) = E_\alpha(z + \delta z)|\alpha(z + \delta z)) \quad (\text{A.77})$$

gelten. Nach Taylorentwicklung aller  $z$ -abhängigen Größen erhält man daraus

$$\begin{aligned} & \left( \underline{\mathcal{M}}(z) + \delta z (\partial_z \underline{\mathcal{M}}(z)) + \frac{1}{2!}(\delta z)^2 (\partial_z^2 \underline{\mathcal{M}}(z)) \right) \\ & \times \left( |\alpha(z)) + \delta z \partial_z |\alpha(z)) + \frac{1}{2!}(\delta z)^2 \partial_z^2 |\alpha(z)) \right) + \mathcal{O}((\delta z)^3) \\ & = \left( E_\alpha(z) + \delta z (\partial_z E_\alpha(z)) + \frac{1}{2!}(\delta z)^2 (\partial_z^2 E_\alpha(z)) \right) \\ & \times \left( |\alpha(z)) + \delta z \partial_z |\alpha(z)) + \frac{1}{2!}(\delta z)^2 \partial_z^2 |\alpha(z)) \right) + \mathcal{O}((\delta z)^3) . \end{aligned} \quad (\text{A.78})$$

Wie man sieht, läuft dies auf eine Störungsentwicklung hinaus. Der reelle Parameter  $\lambda$  entspricht nun  $\delta z$ , desweiteren identifiziert man

$$|\alpha^n) \hat{=} \left[ \frac{1}{n!} (\partial_z)^n |\alpha(z)) \right], \quad E_\alpha^n \hat{=} \left[ \frac{1}{n!} (\partial_z)^n E_\alpha(z) \right], \quad \underline{\mathcal{M}}_n \hat{=} \left[ \frac{1}{n!} (\partial_z)^n \underline{\mathcal{M}}(z) \right]. \quad (\text{A.79})$$

Der einzige Unterschied zum letzten Abschnitt ist, dass nun die Störung der Matrix  $\underline{\mathcal{M}}(z)$  nicht mehr linear in  $\delta z$  ist, sondern Beiträge von beliebig hoher Ordnung in  $\delta z$  enthält, d.h. es gilt mit  $\underline{\mathcal{M}}_n$  aus (A.79)

$$\underline{\mathcal{M}}(z + \delta z) = \underline{\mathcal{M}}(z) + \sum_{n=1}^{\infty} (\delta z)^n \underline{\mathcal{M}}_n. \quad (\text{A.80})$$

In den Formeln des letzten Abschnitts entspricht dies einer Entwicklung der gestörten Massenmatrix nach dem Parameter  $\lambda$ ,

$$\underline{\mathcal{M}}(\lambda) = \underline{\mathcal{M}}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \underline{\mathcal{M}}_n, \quad (\text{A.81})$$

wobei die  $\underline{\mathcal{M}}_n$  in dieser Gleichung natürlich nichts mit den Ortsableitungen aus (A.79) zu tun haben. Die Herleitung aus dem letzten Abschnitt kann nun im Prinzip übernommen werden. Auf diese Weise gelangt man schließlich zu einer Störungsentwicklung des Quasiprojektors  $\underline{\mathbb{P}}_\alpha(\lambda)$ , in der folgende Ersetzung des ursprünglichen Störanteils  $\lambda \underline{\mathcal{M}}_1$  vorgenommen wurde:

$$\lambda \underline{\mathcal{M}}_1 \longrightarrow \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \underline{\mathcal{M}}_n. \quad (\text{A.82})$$

Die Entwicklung (A.73) wird dann nach Ausmultiplikation zu

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\alpha(\lambda) = & \mathbb{P}_\alpha^0 + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0]}{E_\alpha^0 - E_\beta^0} \\
& + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda^2 \mathcal{M}_2 \mathbb{P}_\beta^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda^2 \mathcal{M}_2 \mathbb{P}_\alpha^0]}{E_\alpha^0 - E_\beta^0} \\
& + \sum_{\beta, \gamma \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\gamma^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\gamma^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 + \mathbb{P}_\gamma^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0]}{(E_\alpha^0 - E_\gamma^0)(E_\alpha^0 - E_\beta^0)} \\
& - \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 + \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 + \mathbb{P}_\beta^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\alpha^0 \lambda \mathcal{M}_1 \mathbb{P}_\beta^0]}{(E_\alpha^0 - E_\beta^0)^2} \\
& + \mathcal{O}(\lambda^3) .
\end{aligned} \tag{A.83}$$

Nur der Beitrag aus der zweiten Zeile, der zweiter Ordnung in  $\lambda$  ist, ist neu hinzugekommen. Er stammt aus der (ursprünglichen) ersten Ordnung von (A.73). Alle weiteren, neuen Beiträge sind mindestens von der Ordnung  $\lambda^3$  und treten deshalb nicht in obiger Formel auf.

Nun wollen wir diese allgemeinen Ergebnisse wieder auf den hier vorliegenden Fall übertragen. Wir identifizieren wieder  $\delta z$  als den Störparameter und erhalten dann eine gestörte Massenmatrix der Form (A.80), wobei nun die  $\mathcal{M}_n$  aus (A.79) zu übernehmen sind. Wir wollen die Entwicklung der gestörten Quasiprojektoren

$$\mathbb{P}_\alpha(z + \delta z) = |\alpha(z + \delta z)\rangle \langle \widetilde{\alpha(z + \delta z)}| , \quad (\alpha = 1, \dots, N) , \tag{A.84}$$

nach den ungestörten Quasiprojektoren

$$\mathbb{P}_\alpha(z) = |\alpha(z)\rangle \langle \widetilde{\alpha(z)}| , \quad (\alpha = 1, \dots, N) , \tag{A.85}$$

erhalten, um damit die Entwicklung der Zustände  $|\alpha(z + \delta z)\rangle$  durch die Projektion

$$|\alpha(z + \delta z)\rangle = \mathbb{P}_\alpha(z + \delta z) |\alpha(z)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\delta z)^n \partial_z^n |\alpha(z)\rangle \tag{A.86}$$

zu berechnen. Aus der Ordnung  $(\delta z)^n$  der Entwicklung des Quasiprojektors erhalten wir dann gemäß Gl. (A.86) einen Ausdruck für die  $n$ -te Ableitung des Zustand  $|\alpha(z)\rangle$  an der Stelle  $z$ . Dies wird dann schließlich die Berechnung der Ableitungsmatrizen

$$\mathcal{D}_{\beta\alpha}^{(n)}(z) = (\widetilde{\beta(z)} | \partial_z^n | \alpha(z) \rangle , \quad (n \in \mathbb{N}) , \tag{A.87}$$

ermöglichen. Wir erhalten also aus (A.83) mit den Ersetzungen

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\alpha(\lambda) &\longrightarrow \mathbb{P}_\alpha(z + \delta z) , \\
\mathbb{P}_\alpha^0 &\longrightarrow \mathbb{P}_\alpha(z) , \\
E_\alpha^0 &\longrightarrow E_\alpha(z) , \\
\lambda &\longrightarrow \delta z , \\
\mathcal{M}_n &\longrightarrow \frac{1}{n!} \partial_z^n \mathcal{M}(z)
\end{aligned} \tag{A.88}$$

die Formel

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\alpha(z + \delta z) = & \mathbb{P}_\alpha(z) \\
& + (\delta z) \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\beta(z) + \mathbb{P}_\beta(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)]}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)} \right) \\
& + (\delta z)^2 \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{[\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z^2 \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\beta(z) + \mathbb{P}_\beta(z)(\partial_z^2 \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)]}{2!(E_\alpha(z) - E_\beta(z))} \right. \\
& \quad - \sum_{\beta \neq \alpha} \left[ \frac{\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\beta(z)}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2} \right. \\
& \quad \quad + \frac{\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\beta(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2} \\
& \quad \quad \left. + \frac{\mathbb{P}_\beta(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2} \right] \\
& \quad + \sum_{\beta, \gamma \neq \alpha} \left[ \frac{\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\beta(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\gamma(z)}{(E_\alpha(z) - E_\gamma(z))(E_\alpha(z) - E_\beta(z))} \right. \\
& \quad \quad + \frac{\mathbb{P}_\beta(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\gamma(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)}{(E_\alpha(z) - E_\gamma(z))(E_\alpha(z) - E_\beta(z))} \\
& \quad \quad \left. + \frac{\mathbb{P}_\gamma(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\alpha(z)(\partial_z \mathcal{M}(z))\mathbb{P}_\beta(z)}{(E_\alpha(z) - E_\gamma(z))(E_\alpha(z) - E_\beta(z))} \right] \Bigg) \\
& + \mathcal{O}((\delta z)^3) .
\end{aligned} \tag{A.89}$$

Wir lesen also gemäß (A.86) die Ableitungen des Zustands  $|\alpha(z)\rangle$  wie folgt ab:

$$\partial_z |\alpha(z)\rangle = \sum_{\beta \neq \alpha} |\beta(z)\rangle \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)} \tag{A.90}$$


---

und

$$\begin{aligned}
\partial_z^2 |\alpha(z)\rangle = \sum_{\beta \neq \alpha} |\beta(z)\rangle & \left[ \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z^2 \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)} \right. \\
& - 2! \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z)) (\widetilde{\alpha(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2} \\
& + 2! \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \gamma(z)) (\widetilde{\gamma(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{(E_\alpha(z) - E_\gamma(z)) (E_\alpha(z) - E_\beta(z))} \Big] \\
& - |\alpha(z)\rangle \left[ 2! \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{(\widetilde{\alpha(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \beta(z)) (\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2} \right]. \tag{A.91}
\end{aligned}$$

Man erkennt, dass  $\partial_z^2 |\alpha(z)\rangle$  im Gegensatz zu  $\partial_z |\alpha(z)\rangle$  auch eine Komponente in  $|\alpha(z)\rangle$ -Richtung hat. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass dies dazu führt, dass die Norm des gestörten Zustands  $|\alpha(z + \delta z)\rangle$  dem bereits früher in (A.74) berechneten Ausdruck entspricht (natürlich nach den Ersetzungen aus (A.88)).

Die Matrixelemente der Ortsableitungsmatrizen (A.87) lauten also mit (A.90)

$$\begin{aligned}
\underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(z) &= (\widetilde{\beta(z)} | \partial_z |\alpha(z)\rangle) \\
&\stackrel{\beta \neq \alpha}{=} \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)}, \tag{A.92a}
\end{aligned}$$

$$\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(1)}(z) = 0 \tag{A.92b}$$

und mit (A.91)

$$\begin{aligned}
\underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(2)}(z) &= (\widetilde{\beta(z)} | \partial_z^2 |\alpha(z)\rangle) \\
&\stackrel{\beta \neq \alpha}{=} \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z^2 \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)} \\
&- 2! \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z)) (\widetilde{\alpha(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2} \\
&+ 2! \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \gamma(z)) (\widetilde{\gamma(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{(E_\alpha(z) - E_\gamma(z)) (E_\alpha(z) - E_\beta(z))}, \tag{A.93a}
\end{aligned}$$

$$\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(2)}(z) = 2! \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{(\widetilde{\alpha(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \beta(z)) (\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \mathcal{M}(z)) | \alpha(z))}{(E_\alpha(z) - E_\beta(z))^2}. \tag{A.93b}$$


---

Dabei ist zu beachten, dass die Nebendiagonalelemente und die Diagonalelemente jeweils separat angegeben wurden. Um die obigen Matrixelemente berechnen zu können, muss man sich also zunächst die Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}(z)$  beschaffen. In deren Matrixelementen treten dann die  $z$ -abhängigen elektrischen und magnetischen Felder explizit auf, die vorgegeben sein müssen. Diese Matrixelemente sind dann die einzigen, die auch in den Ableitungen der Massenmatrix ungleich Null sind. Schließlich muss man noch die ortsabhängigen Eigenvektoren  $|\alpha(z)\rangle$  zu  $\underline{\mathcal{M}}(z)$  kennen.

Eine weitere nützliche Schreibweise der obigen Matrixelemente können wir unter Verwendung der Resultate aus (A.92) erhalten:

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(2)}(z) &\stackrel{\beta \neq \alpha}{=} \frac{(\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z^2 \underline{\mathcal{M}}(z)) | \alpha(z))}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)} \\ &\quad - 2 \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(z) \frac{[(\widetilde{\alpha(z)} | (\partial_z \underline{\mathcal{M}}(z)) | \alpha(z)) - (\widetilde{\beta(z)} | (\partial_z \underline{\mathcal{M}}(z)) | \beta(z))]}{E_\alpha(z) - E_\beta(z)} \\ &\quad + 2 \sum_{\substack{\gamma \neq \alpha, \\ \gamma \neq \beta}} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\gamma}^{(1)}(z) \underline{\mathcal{D}}_{\gamma\alpha}^{(1)}(z) \frac{E_\beta(z) - E_\gamma(z)}{E_\alpha(z) - E_\gamma(z)} \end{aligned} \quad (\text{A.94})$$

$$\underline{\mathcal{D}}_{\alpha\alpha}^{(2)}(z) = -2 \sum_{\beta \neq \alpha} \underline{\mathcal{D}}_{\alpha\beta}^{(1)}(z) \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(z) .$$

An dieser Stelle wollen wir ausdrücklich darauf hinweisen, dass die hier vorgestellte Methode zur Berechnung der Matrixelemente für die Betrachtung geometrischer Phasen (siehe Kapitel 7) ungeeignet ist. Durch die Verwendung störungstheoretischer Methoden enthält die erste Ortsableitung eines Eigenzustands  $|\alpha(z)\rangle$  nur Beiträge von Eigenzuständen mit Indizes  $\beta \neq \alpha$ . Für geometrische Phasen (im adiabatischen Grenzfall) muss aber gerade  $(\widetilde{\alpha(z)} | \partial_z | \alpha(z)) \neq 0$  gelten.

Die hier verwendete Methode legt also automatisch für jedes  $Z$  eine spezielle, lokale Phase der Eigenzustände fest. Wählt man nun eine andere lokale Phase<sup>4</sup> d.h.

$$|\alpha(z)\rangle = e^{i\phi_\alpha(z)} |\alpha'(z)\rangle , \quad (\text{A.95})$$

so folgt

$$0 = (\widetilde{\alpha(z)} | \partial_z | \alpha(z)) = i \partial_z \phi_\alpha(z) + (\widetilde{\alpha'(z)} | \partial_z | \alpha'(z)) \quad (\text{A.96})$$

---

<sup>4</sup>Die Eigenzustände der Massenmatrix sind nur bis auf eine lokale Phase bestimmt. Die Orthonormalität der linken und rechten Eigenzustände bleibt erhalten, solange  $|\alpha(z)\rangle = \exp\{i\phi_\alpha(z)\} |\alpha'(z)\rangle$  und  $(\widetilde{\alpha(z)} | = \exp\{-i\phi_\alpha(z)\} (\widetilde{\alpha'(z)} |$  gewählt wird, wobei  $\phi_\alpha(z)$  eine beliebige, komplexe Funktion sein darf. Fordert man allerdings die Normierung der rechten Eigenzustände, so wie wir es in der vorliegenden Arbeit stets getan haben, muss  $\phi_\alpha(z)$  reell sein. Wir müssen berücksichtigen, dass der geometrische Phasenwinkel hier im Allgemeinen nicht reell ist, da wir Eigenzustände einer nichthermiteschen Matrix betrachten, siehe dazu auch Anhang 7.

---

und die geometrische Phase der Zustände  $|\alpha'(z)\rangle$  wäre für  $\partial_z \phi_\alpha(z) \neq 0$  i.A. nicht mehr identisch Null.

Mit der hier vorgestellten Methode sammelt sich die geometrische Phase in den Zuständen an. Hat man ein adiabatisches Potential, das sich an den Orten  $z_0$  und  $z_D$  gleicht, so ist mit der hier verwendeten Methode nicht mehr sichergestellt, dass  $|\alpha(z_0)\rangle = |\alpha(z_D)\rangle$ . Der Unterschied ist gerade die geometrische Phase, d.h. es gilt  $|\alpha(z_D)\rangle = \exp\{i\gamma_\alpha(z_D)\} |\alpha(z_0)\rangle$ , wobei  $\gamma_\alpha(z_D)$  der geometrische Phasenwinkel ist.

In praktischen Rechnungen wird das Eigenwertproblem der Massenmatrix an jedem Ort numerisch gelöst. Ist  $\mathcal{M}(z_0) = \mathcal{M}(z_D)$ , so gilt sicher  $|\alpha(z_0)\rangle = |\alpha(z_D)\rangle$ , d.h. in numerischen Rechnungen sollte der geometrische Phasenfaktor leicht zu extrahieren sein, denn dann ist i.A. auch  $\mathcal{D}_{\alpha\alpha}^{(1)}(z) \neq 0$ .

## A.5 Die Paritätstransformation der geometrischen Flussdichten

In Abschnitt 7.3.4 diskutieren wir P-erhaltende und P-verletzende geometrische Flussdichten. Um wirklich zu verstehen, warum diese Flussdichten sich unter P-Transformation entsprechend verhalten, müssen wir wissen, wie die P-Transformation auf die ungestörte (d.h.  $\delta_1 = \delta_2 = 0$ ) Massenmatrix  $\mathcal{M}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$ , die P-verletzenden Matrizen  $\mathcal{M}_{\text{PV}}^{(1,2)}$  und die ungestörten Eigenzustände  $|\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\rangle$  wirkt. Wir halten uns an die in Abschnitt 7.3.4 verwendete Notation.

Die P-Transformation (auch räumliche Inversion genannt) ist die Punktspiegelung der räumlichen Koordinaten,

$$P : \quad \boldsymbol{x} \longrightarrow -\boldsymbol{x} . \quad (\text{A.97})$$

Bei der Anwendung der P-Transformation auf vektorwertige Größen unterscheidet man zwischen polaren und axialen Vektoren. Während polare Vektoren ihr Vorzeichen unter P-Transformation ändern, sind axiale Vektoren invariant unter P-Transformation. Der Ortsvektor  $\boldsymbol{x}$  und der Impuls  $\boldsymbol{p}$  sind z.B. polare Vektoren, Drehimpulse dagegen sind axiale Vektoren. Das elektrische Feld  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  wechselt als polarer Vektor sein Vorzeichen unter P-Transformation, das magnetische Feld  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  dagegen bleibt als axialer Vektor invariant (siehe hierzu auch [49], Kap. 6.10, Abschnitt B, S. 269 f. und Tabelle 6.1, S. 271).

Die Transformationseigenschaften der einfachen Vektoren übertragen sich direkt auf die in der Quantenmechanik zugeordneten Operatoren, die wir uns im Unterraum der atomaren Zustände mit Hauptquantenzahl  $n = 2$  in der Gesamtdrehimpulsbasis  $|j\rangle$  (siehe Gl. (A.27) in Anhang A.2) als Matrizen dargestellt denken können. Die Darstellung der

Paritätstransformation in dieser Basis wollen wir mit  $\underline{\mathcal{P}}$  bezeichnen. Es gilt dann

$$\underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbf{x}} \underline{\mathcal{P}}^\dagger = -\underline{\mathbf{x}} \quad (\text{A.98})$$

und somit auch für das Dipolmoment  $\underline{\mathbf{D}}$ ,

$$\underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbf{D}} \underline{\mathcal{P}}^\dagger = -e \underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbf{x}} \underline{\mathcal{P}}^\dagger = +e \underline{\mathbf{x}} = -\underline{\mathbf{D}} . \quad (\text{A.99})$$

Das magnetische Moment des Atoms (bzw. des Elektrons, da der Beitrag des Kerns vernachlässigbar klein ist), bleibt dagegen invariant unter P-Transformation, da es nur von Drehimpulsoperatoren abhängt. Es gilt (siehe auch Gl. (B.17))

$$\underline{\mathcal{P}} \underline{\boldsymbol{\mu}} \underline{\mathcal{P}}^\dagger = -\mu_B \underline{\mathcal{P}} (\underline{\mathbf{L}} + g \underline{\mathbf{S}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger = -\mu_B (\underline{\mathbf{L}} + g \underline{\mathbf{S}}) = \underline{\boldsymbol{\mu}} . \quad (\text{A.100})$$

Betrachten wir nun den P-erhaltenden Anteil der Massenmatrix aus Gl. (7.69) ,

$$\underline{\mathcal{M}}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) = \underline{\tilde{\mathcal{M}}}_0 - \underline{\mathbf{D}} \cdot \underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}} - \underline{\boldsymbol{\mu}} \cdot \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}} . \quad (\text{A.101})$$

Wenden wir hierauf die P-Transformation an, müssen wir dabei nur die Wirkung auf die freie, P-erhaltende Massenmatrix  $\underline{\tilde{\mathcal{M}}}_0$ , sowie auf die Matrizen  $\underline{\mathbf{D}}$  und  $\underline{\boldsymbol{\mu}}$  für das Dipolmoment und das magnetische Moment berücksichtigen. Die Feldstärken bleiben von der P-Transformation, die eine Matrixmultiplikation ist, unberührt. Der Anteil  $\underline{\tilde{\mathcal{M}}}_0$  bleibt invariant unter P-Transformation, denn er repräsentiert das freie Atom ohne P-verletzende Beiträge. Das Coulomb-Potential, in dem das Elektron sich befindet, ist kugelsymmetrisch und hängt somit nur vom Betrag des Ortsvektors des Elektrons ab. Weitere (relativistische) Korrekturen wie Fein- und Hyperfeinstruktur hängen neben Drehimpulsoperatoren ebenfalls nur vom Betrag des Ortsvektors ab. Eine ausführliche Abhandlung über die quantenmechanischen Beschreibung des Wasserstoffatoms findet sich z.B. in [50].

Mit Gl. (A.99) und (A.100) erhalten wir also

$$\underline{\mathcal{P}} \underline{\mathcal{M}}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger = \underline{\tilde{\mathcal{M}}}_0 + \underline{\mathbf{D}} \cdot \underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}} - \underline{\boldsymbol{\mu}} \cdot \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}} = \underline{\mathcal{M}}(-\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) . \quad (\text{A.102})$$

Eine Anwendung der P-Transformation auf die Eigenzustände von  $\underline{\mathcal{M}}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}})$  wird demzufolge einen Eigenzustand zu den P-Transformierten Feldstärken  $(-\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}})$  liefern. Im allgemeinen wird aber noch eine Phasenfaktor aufgrund der intrinsischen Parität des atomaren Zustands hinzukommen. Um diese Phasenfaktoren in der Diskussion der geometrischen Flussdichten in Abschnitt 7.3.4 zu vermeiden, bietet sich die Betrachtung der P-Transformation der (ebenfalls ungestörten) Quasiprojektoren  $\underline{\mathbb{P}}_\alpha(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}})$  an. Diese kann man mit Hilfe der Resolvente (vgl. [31], Abschnitt 3.3)

$$\frac{1}{\underline{\mathcal{M}}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) - \xi \underline{\mathbb{I}}} = \sum_\alpha \frac{\underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}})}{E_\alpha^{(0)}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) - \xi} , \quad (\xi \in \mathbb{C}) \quad (\text{A.103})$$

erhalten. Wir haben hier die Vollständigkeitsrelation für die Quasiprojektoren  $\underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) = |\alpha^{(0)}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}})\rangle \langle \alpha^{(0)}(\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}})|$  aus Gl. (A.21d) verwendet und die Schreibweise

$E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  für die Energieeigenwerte der P-erhaltenden Massenmatrix (A.101) aus Kap. 7 übernommen. Wenden wir die P-Transformation auf die linke Seite dieser Gleichung an, so folgt

$$\underline{\mathcal{P}} \frac{1}{\underline{\mathcal{M}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - \xi \mathbb{1}} \underline{\mathcal{P}}^\dagger = \frac{1}{\underline{\mathcal{M}}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - \xi \mathbb{1}} = \sum_\alpha \frac{\underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - \xi} . \quad (\text{A.104})$$

Dies muss aber gleich der P-Transformierten rechten Seite von Gl. (A.103) sein, d.h.

$$\sum_\alpha \frac{\underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{E_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - \xi} = \sum_\alpha \frac{\underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger}{E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - \xi} . \quad (\text{A.105})$$

Bei angenommener Nichtentartung der Eigenwerte  $E_\alpha(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  kann man nun die Polstruktur in der Variable  $\xi$  betrachten, die auf beiden Seiten der Gleichung natürlich identisch sein muss. Bei geeigneter Durchnummerierung in  $\alpha$  für elektrische Felder  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  und  $-\boldsymbol{\mathcal{E}}$  erhält man also

$$E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = E_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) , \quad (\text{A.106})$$

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger &= \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) , \\ (\alpha &= 1 \dots, N) . \end{aligned} \quad (\text{A.107})$$

Die Gleichung (A.106) drückt dabei nichts anderes aus als die Abwesenheit eines linearen Stark-Effekts, die (auch für den Fall metastabiler Atome) für ein statisches elektrisches Feld schon seit langer Zeit bekannt ist (siehe z.B. [51], Abschnitt 4.1 und die dort aufgeführten Referenzen).

Nun untersuchen wir die Wirkung auf die (auf  $\delta_{1,2}$  normierten) Matrixdarstellungen

$$\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \left( (\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) | H_{\text{PV}}^{(\varkappa)} | \beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})) / \delta_\varkappa \right) , \quad (\varkappa = 1, 2) , \quad (\text{A.108})$$

der P-verletzenden Hamiltonoperatoren  $H_{\text{PV}}^{(1,2)}$ , deren Matrixelemente in der Darstellung der Gesamtdrehimpulszustände in Anhang B.1.1, Gl. (B.9) angegeben sind.

Wie man [31], Gl. (2.11) und (2.12) entnehmen kann, sind die Operatoren  $H_{\text{PV}}^{(1,2)}$  nach der sogenannten nichtrelativistischen Reduktion gegeben durch

$$H_{\text{PV}}^{(1)} = C_{\text{PV}}^{(1)} \{ \delta^3(\boldsymbol{x}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) \delta^3(\boldsymbol{x}) \} , \quad (\text{A.109})$$

$$H_{\text{PV}}^{(2)} = C_{\text{PV}}^{(2)} \{ \delta^3(\boldsymbol{x}) (\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) (\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \delta^3(\boldsymbol{x}) \} , \quad (\text{A.110})$$

mit zwei Konstanten  $C_{\text{PV}}^{(1,2)} \in \mathbb{R}$ , die für die folgende Untersuchung nicht weiter interessant sind. In  $H_{\text{PV}}^{(1)}$  steht ein Produkt des axialen Vektoroperators  $\boldsymbol{\sigma}$  für den Elektronspin mit dem polaren Vektoroperator des Impulses  $\boldsymbol{p}$ . Unter P-Transformation wird  $H_{\text{PV}}^{(1)}$  also sicher



sein Vorzeichen ändern. In  $H_{\text{PV}}^{(2)}$  kommt noch das P-invariante Produkt von Kernspin und Elektronspin hinzu, also haben wir

$$PH_{\text{PV}}^{(\varkappa)}P^\dagger = -H_{\text{PV}}^{(\varkappa)} , \quad (\varkappa = 1, 2) . \quad (\text{A.111})$$

Schreiben wir  $\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  mit Hilfe der Quasiprojektoren als

$$\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \sum_{\alpha, \beta} \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{H}_{\text{PV}}^{(\varkappa)} \underline{\mathbb{P}}_\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) , \quad (\text{A.112})$$

wobei  $\underline{H}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}$  die P-verletzenden Matrizen in der  $|j\rangle$ -Darstellung seien, so folgt mit (A.107) und (A.111)

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{P}} \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger &= \sum_{\alpha, \beta} \underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger \underline{\mathcal{P}} \underline{H}_{\text{PV}}^{(\varkappa)} \underline{\mathcal{P}}^\dagger \underline{\mathcal{P}} \underline{\mathbb{P}}_\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger \\ &= - \sum_{\alpha, \beta} \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{H}_{\text{PV}}^{(\varkappa)} \underline{\mathbb{P}}_\beta^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \\ &= -\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) . \end{aligned} \quad (\text{A.113})$$

Mit der gleichen Methode<sup>5</sup> kann man sich davon überzeugen, dass für die lokalen Matrixdarstellung des Dipolmoments und des magn. Moments gilt

$$\underline{\mathcal{P}} \underline{\mathcal{D}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger = -\underline{\mathcal{D}}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) , \quad (\text{A.114})$$

bzw.

$$\underline{\mathcal{P}} \underline{\boldsymbol{\mu}}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{\mathcal{P}}^\dagger = +\underline{\boldsymbol{\mu}}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) . \quad (\text{A.115})$$

In der P-erhaltenden geometrischen Flussdichte  $\mathcal{J}_{\alpha, \ell}^{(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  aus Gl. (7.82a) genügt es, den repräsentativen Beitrag

$$\begin{aligned} &\sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{D}_{i, \alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{j, \beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \\ &= \text{Sp} \left[ \underline{D}_i \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{\mathbb{P}}_\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_\beta^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \right) \underline{D}_j \underline{\mathbb{P}}_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.116})$$

zu betrachten. Durch geschicktes Einschieben von Einheitsmatrizen in der Form  $\underline{\mathbb{1}} = \underline{\mathcal{P}}^\dagger \underline{\mathcal{P}}$  zwischen den Dipolmomenten und den Projektoren, erhalten wir unter Verwendung der

---

<sup>5</sup>Durch Ersetzen von  $\underline{H}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}$  durch  $\underline{\mathcal{D}}$  bzw.  $\underline{\boldsymbol{\mu}}$  in (A.113) und Anwendung der Relationen (A.99), (A.100) sowie (A.107).

obigen Relationen

$$\begin{aligned}
& \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{D}_{i,\alpha\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{j,\beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \\
&= \text{Sp} \left[ \underline{D}_i \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\mathbb{P}_{\beta}^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \right) \underline{D}_j \mathbb{P}_{\alpha}^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \right] \\
&= \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\underline{D}_{i,\alpha\beta}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{j,\beta\alpha}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} .
\end{aligned} \tag{A.117}$$

Die beiden Vorzeichen, die bei der P-Transformation der Dipolmomente entstehen, heben sich gegenseitig auf. Um das Vorzeichen des elektrischen Feldes in den Argumenten der Energien umzukehren, haben wir Gl. (A.106) verwendet. Die Argumentation für die Flussdichte  $\mathcal{J}_{\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  verläuft vollkommen analog. Es sind lediglich die Dipolmomente durch die magnetischen Momente zu ersetzen, die ja ohnehin unter P-Transformation invariant sind.

Insgesamt folgt hieraus also die Invarianz der P-erhaltenden geometrischen Flussdichten unter P-Transformation<sup>6</sup>,

$$\mathcal{J}_{\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \mathcal{J}_{\alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PC})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) , \quad \mathcal{J}_{\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \mathcal{J}_{\alpha}^{(\mathcal{B}, \text{PC})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) . \tag{A.118}$$

In den P-verletzenden Flussdichten  $\mathcal{J}_{\varkappa, \alpha}^{(\mathcal{E}, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  ( $\varkappa = 1, 2$ ) wird jeweils ein Dipolmoment durch den P-verletzenden Ausdruck  $D_{i,\alpha\beta}^{(\varkappa, \text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})$  aus Gl. (7.85a) ersetzt, der wiederum ein Produkt von Dipolmatrixelementen und Matrixelementen der P-verletzenden Matrix  $\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}$  ist. Letztendlich müssen wir das Transformationsverhalten von Termen der Form

$$\begin{aligned}
& \sum_{\beta, \gamma \neq \alpha} \frac{\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}, \alpha\gamma}^{(\varkappa)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{i,\gamma\beta}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \underline{D}_{j,\beta\alpha}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right) \left(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \\
&= \text{Sp} \left[ \underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)} \left( \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\mathbb{P}_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\gamma}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \right) \right. \\
&\quad \times \underline{D}_i \left( \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\mathbb{P}_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})}{\left(E_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) - E_{\beta}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}})\right)^2} \right) \underline{D}_j \mathbb{P}_{\alpha}^{(0)}(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) \left. \right]
\end{aligned} \tag{A.119}$$

studieren. Der wesentliche Unterschied zu dem in Gl. (A.116) ist die zusätzliche P-verletzende Matrix  $\underline{\mathcal{M}}_{\text{PV}}^{(\varkappa)}$ , die beim Einschleusen der P-Transformationen ein zusätzliches

<sup>6</sup>Die Bezeichnung als P-erhaltende geometrische Flussdichten ist somit gerechtfertigt.

Minuszeichen liefern wird. Während sich die Vorzeichenwechsel in den Dipolmomenten gegenseitig aufheben (bzw. die magn. Momente im Fall von  $\mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{B},\text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}},\boldsymbol{\mathcal{B}})$  invariant bleiben), entsteht so also ein globales Vorzeichen beim Übergang von  $\boldsymbol{\mathcal{E}} \rightarrow -\boldsymbol{\mathcal{E}}$  und es folgt schließlich

$$\mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{E},\text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}},\boldsymbol{\mathcal{B}}) = -\mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{E},\text{PV})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}},\boldsymbol{\mathcal{B}}) , \quad \mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{B},\text{PV})}(\boldsymbol{\mathcal{E}},\boldsymbol{\mathcal{B}}) = -\mathcal{J}_{\varkappa,\alpha}^{(\mathcal{B},\text{PV})}(-\boldsymbol{\mathcal{E}},\boldsymbol{\mathcal{B}}) ,$$

$$(\varkappa = 1, 2) .$$
(A.120)



# Anhang B

---

## Grundlagen für die Beschreibung von metastabilem Wasserstoff und Deuterium

---

In diesem Anhang wollen wir die nichthermiteschen Massenmatrizen für Wasserstoff und Deuterium in den Unterräumen mit den Hauptquantenzahlen  $n = 1, 2$  explizit angeben und deren Berechnung skizzieren. Wir verweisen dabei häufig auf [36], wo die Berechnungen für Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum ausführlich dargestellt werden.

Weiterhin werden wir die Eigenwertprobleme für Wasserstoff und Deuterium numerisch lösen, auch in Abhängigkeit von einem elektrischen bzw. magnetischen Feld in 3-Richtung. Beide Felder werden getrennt voneinander betrachtet.

### B.1 Allgemeine Vorbetrachtungen

#### B.1.1 Beiträge zur Massenmatrix

In der vorliegenden Arbeit betrachten wir nur wasserstoffartige Atome, d.h. Atome mit nur einem Elektron. Weiterhin betrachten wir den Atomkern näherungsweise als punktförmiges Objekt. Wir haben es somit mit einem quantenmechanischen Zwei-Teilchen-Problem zu tun, wie wir es bereits in Abschnitt A.2 diskutiert haben. Den Zerfall der angeregten Atome, die wir ja nur im Unterraum der Zustände mit Hauptquantenzahl  $n = 2$  betrachten wollen, implementieren wir mit der Wigner-Weisskopf-Methode, die bereits in Abschnitt A.1 eingeführt wurde.

Wir interessieren uns in diesem Abschnitt nur für die Beschreibung des atomaren Elektrons, nachdem die Schwerpunktsbewegung abgespalten wurde, d.h. wir wollen die Ma-

trixelemente der Massenmatrix

$$\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{R}) = \underline{E}_0 - \frac{i}{2}\underline{\Gamma} + \underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R}) =: \underline{\mathcal{M}}_0 + \underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R}) \quad (\text{B.1})$$

berechnen, die von Gl. (A.44) motiviert wird. Wir arbeiten hier mit der Basis der Gesamtdrehimpulszustände  $|2L_J, F, F_3\rangle$  aus Gl. (A.27). Der radiative Anteil  $H_{\text{rad}}$  des internen atomaren Hamiltonoperators  $H_{\text{int}}$ , siehe Gl. (A.5),

$$H_{\text{int}} = \hat{H} + H_{\text{rad}} \quad (\text{B.2})$$

ist bereits in der Matrix  $\underline{\Gamma}$  berücksichtigt, siehe dazu Abschnitt A.1. Wir verwenden für  $\underline{\Gamma}$  stets eine diagonale Matrix mit entsprechenden Einträgen  $\Gamma_L$ ,  $L = S, P$ , die aus experimentellen Zerfallsraten gewonnen werden. Der stabile Anteil  $\hat{H}$ , der in der Matrix  $\underline{E}_0$  enthalten ist, setzt sich zusammen aus

$$\hat{H} = H_0 + H_{\text{PV}} , \quad (\text{B.3})$$

wobei  $H_0$  bereits relativistische Korrekturen enthalten soll. Wir verwenden für die Bestimmung der Matrixelemente von  $H_0$  experimentelle Literaturwerte für die Lamb-Shift, die Feinstrukturaufspaltung, die Hyperfeinaufspaltung und die Zerfallsbreiten. Genauere Informationen dazu geben wir in den nächsten Abschnitten. Der P-verletzende Hamiltonoperator  $H_{\text{PV}}$  enthält den Beitrag der schwachen Wechselwirkung zwischen Elektron und Atomkern in Form des Austauschs von Z-Bosonen.

Der ortsabhängige Anteil  $\underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R})$  der Massenmatrix berechnet sich aus den angelegten äußeren Feldern. Gemäß Definition (A.40) kommt noch der Beitrag eines auf das gesamte Atom wirkenden äußeren Potentials  $V_{\text{ext}}(\mathbf{R})\mathbb{1}$  hinzu, den wir hier allerdings nicht brauchen, da wir nur neutrale, wasserstoffartige Atome (Wasserstoff und Deuterium) betrachten wollen. Für unsere Zwecke genügt also

$$\underline{V}_{\text{ges}}(\mathbf{R}) \equiv \underline{V}(\mathbf{R}) = \left( \langle j | e\mathbf{r} \cdot \underline{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) + \mu_B(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \cdot \underline{\mathcal{B}}(\mathbf{R}) | k \rangle \right) , \quad (\text{B.4})$$

wobei  $\mathbf{r}$  der Ortsoperator,  $\mathbf{L}$  der Operator des Bahndrehimpulses und  $\mathbf{S}$  der Operator des Spins des Elektrons ist. Weiter ist  $e$  die (positive) Elementarladung,  $g$  der Landé-Faktor des Elektrons und  $\mu_B = e/(2m_e)$  das Bohrsche Magneton. Im einzelnen lauten die Hamiltonoperatoren des elektrischen und magnetischen Felds für das Elektron des neutralen Atoms

$$H_{\underline{\mathcal{E}}}(\mathbf{R}) = -\mathbf{D} \cdot \underline{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) = +e\mathbf{r} \cdot \underline{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) \quad (\text{B.5})$$

und

$$H_{\underline{\mathcal{B}}}(\mathbf{R}) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \underline{\mathcal{B}}(\mathbf{R}) = +\mu_B(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \cdot \underline{\mathcal{B}}(\mathbf{R}) . \quad (\text{B.6})$$

Die Vorzeichen kehren sich hier jeweils um aufgrund der negativen Ladung und des negativen magnetischen Moments des Elektrons.

### B.1.2 Vorgehensweise und Formeln zur Berechnung der Massenmatrix

Die Vorgehensweise bei der Berechnung der einzelnen Beiträge zur Massenmatrix ist stets die gleiche: Man zerlegt die Zustände  $|j\rangle$  der Gesamtdrehimpulsbasis, siehe Gl. (A.27), unter Verwendung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten (CGK) in Produkte der einzelnen Spino­ren für Elektronspin und Kernspin und der nichtrelativistischen Basiszustände  $|n, L, L_3\rangle$  des Atoms:

$$|nL_J, F, F_3\rangle = \sum_{I_3, S_3, L_3, J_3} \langle L, L_3; \tfrac{1}{2}, S_3 | J, J_3 \rangle \langle J, J_3; I, I_3 | F, F_3 \rangle |n, L, L_3\rangle | \tfrac{1}{2}, S_3 \rangle | I, I_3 \rangle . \quad (\text{B.7})$$

Zunächst wollen wir die Matrix  $\underline{E}_0$ , also den hermiteschen Anteil der freien Massenmatrix  $\mathcal{M}_0$  berechnen. Hierzu verwenden wir die Energien aus dem Termschema des jeweils betrachteten Atoms (siehe nächster Abschnitt) und sind so in der Lage, die Diagonalelemente von  $\underline{E}_0$  in Abhängigkeit der Lamb-Shift  $\mathcal{S}$ , der Feinstrukturaufspaltung  $\Delta$  und der Hyperfeinstrukturaufspaltung  $\mathcal{A}$  des Grundzustandes auszudrücken. Es verbleiben noch die nichtdiagonalen Beiträge des Hyperfeinstruktur-Hamiltonoperators  $H_{\text{Hfs}}$  und die Beiträge des P-verletzenden Hamiltonoperators  $H_{\text{PV}}$ .

Die Berechnung der Matrixelemente von  $H_{\text{Hfs}}$  ist ausführlich in [36], Kap. 3.3.1, S. 20, diskutiert. Ein Standardwerk über die quantenmechanische Behandlung von Atomen mit einem oder zwei Elektronen, in dem neben vielen anderen Dingen auch die Hyperfeinstruktur von Wasserstoff detailliert behandelt wird, ist das Buch von Bethe und Salpeter [50]. Für  $n = 1$  ist  $H_{\text{Hfs}}$  diagonal, für  $n = 2$  tritt eine Mischung innerhalb der  $2P$ -Zustände auf. Mit der in [36] hergeleiteten Formel

$$\begin{aligned} \langle 2P_{J'}, F', F'_3 | H_{\text{Hfs}} | 2P_J, F, F_3 \rangle &= C_{\text{Hfs}}(J', J, I, F) \delta_{F', F} \delta_{F'_3, F_3} , \\ C_{\text{Hfs}}(J', J, I, F) &= \frac{1}{20} \frac{e}{m_e} \mu_K g_I \left\langle \frac{1}{4\pi r^3} \right\rangle_{n=2, L=1} \\ &\times \left( (-1)^{F+I-\frac{1}{2}} \sqrt{6(2I+1)(I+1)I(2J'+1)(2J+1)} [37 - 6J'(J'+1) - 6J(J+1)] \right. \\ &\times \left. \begin{Bmatrix} J & 1 & J' \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & 1 & J' \\ I & F & I \end{Bmatrix} + 8[F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \delta_{J', J} \right) \quad (\text{B.8}) \end{aligned}$$

lässt sich das Verhältnis zwischen den (experimentell gemessenen) Diagonalelementen und den Nebendiagonalelementen berechnen. Hierzu benötigt man allerdings entsprechende Formeln für die sog. Wignerschen  $6j$ -Symbole, die in (B.8) an den geschweiften Klammern zu erkennen sind.

Die Berechnung der Matrixelemente von  $H_{PV}$  ist ebenfalls ausführlich in [36] dargestellt. Dort wurde für  $n = 2$  gezeigt, dass

$$\begin{aligned} \langle 2S_{1/2}, F', F'_3 | H_{PV}^{(1)} | 2P_{1/2}, F, F_3 \rangle &= -i\delta_1 \mathcal{S} \delta_{F',F} \delta_{F'_3,F_3} , \\ \langle 2S_{1/2}, F', F'_3 | H_{PV}^{(2)} | 2P_{1/2}, F, F_3 \rangle &= -i\delta_2 \mathcal{S} \\ &\quad \times \left[ F(F+1) - I(I+1) - \frac{3}{4} \right] \delta_{F',F} \delta_{F'_3,F_3} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

gilt, wobei die paritätsverletzenden Parameter  $\delta_{1,2}$  gegeben sind durch

$$\delta_i := -\frac{\sqrt{3}G}{64\pi\sqrt{2}} \frac{Q_W^{(i)}}{m_e} \frac{1}{r_B^4 \mathcal{S}} , \quad (i = 1, 2) . \quad (\text{B.10})$$

Hier tauchen neben der Elektronmasse  $m_e$ , dem Bohrschen Radius  $r_B$  und der Lamb-Verschiebung  $\mathcal{S} = E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}}$  noch die Fermi-Konstante

$$G = 1.1663 \cdot 10^{-5} \text{ GeV}^{-2} \quad (\text{B.11})$$

und die schwachen Ladungen

$$\begin{aligned} Q_W^{(1)}(Z, N) &= (1 - 4 \sin^2 \vartheta_W) Z - N , \\ Q_W^{(2)}(Z, N) &= -(1 - 4 \sin^2 \vartheta_W) \left[ G_A^{(u)}(Z, N) - G_A^{(d)}(Z, N) - G_A^{(s)}(Z, N) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

auf. Beiträge der schwereren Quarks  $c, b, t$  wurden vernachlässigt. Die  $G_A^{(q)}$  sind die axialen Formfaktoren der Quarks mit Flavour  $q$ , die aus experimentellen Daten berechnet werden können. Für weitere Informationen dazu sei auf [31], Anhang A verwiesen, sowie auf dort angegebene Referenzen.

Nun wollen wir die Matrixelemente der Hamiltonoperatoren (B.5) und (B.6) für die äußeren Felder berechnen. Für  $H_{\mathcal{E}}(\mathbf{R})$  benötigen wir die Matrixelemente des Ortsoperators  $\mathbf{r}$  des Elektrons, die wir natürlich in der Ortsdarstellung berechnen wollen. Hierzu machen wir Gebrauch von der Ortsdarstellung der Wasserstoff-Wellenfunktionen

$$\langle \mathbf{r} | n, L, L_3 \rangle = \psi_{n,L,L_3}(\mathbf{r}) = R_{n,L}(r) Y_{L,L_3}(\theta, \phi) \quad (\text{B.13})$$

mit der Radialwellenfunktion  $R_{n,L}(r)$  und den Kugelflächenfunktionen  $Y_{L,L_3}(\theta, \phi)$ . Die Radialwellenfunktionen für  $n = 1, 2$  können aus [40], Bd. 2, S. 25, Gl. (7.123) entnommen werden, die Kugelflächenfunktionen z.B. aus dem Buch über Drehimpulse in der Quantenmechanik von Edmonds [52], Anhang 2, Tab. 1, S. 148. Die Konvention aus [40] für die Radialwellenfunktion  $R_{n,L}(r)$  ist, dass  $R_{n,L}(r) \geq 0$  für  $r \rightarrow 0$ . Die für uns interessanten Radialwellenfunktionen lauten dann nach [40], Bd. 2, Gl. (7.123), S. 25:

$$\begin{aligned} R_{1,0}(r) &= \frac{2}{r_B^{3/2}} e^{-r/r_B} , \\ R_{2,0}(r) &= \frac{2}{(2r_B)^{3/2}} \left( 1 - \frac{r}{2r_B} \right) e^{-r/(2r_B)} , \quad R_{2,1}(r) = \frac{1}{(2r_B)^{3/2}} \frac{r}{\sqrt{3} r_B} e^{-r/(2r_B)} . \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$



Die Matrixelemente von  $\mathbf{r}$  sind nur zwischen Zuständen verschiedener Parität, also verschiedener Bahndrehimpulse ungleich Null. Somit gibt es für  $n = 1$  keine von Null verschiedenen Matrixelemente und für  $n = 2$  nur zwischen  $S$ - und  $P$ -Zuständen. Hierfür erhält man

$$\begin{aligned} & \langle 2S_{1/2}, F', F'_3 | \mathbf{r} | 2P_J, F, F_3 \rangle \\ &= -3r_B \sum_{I_3, J_3, J'_3, L_3} \mathbf{e}_{L_3} \langle \frac{1}{2}, J'_3; I, I_3 | F', F'_3 \rangle \langle J, J_3; I, I_3 | F, F_3 \rangle \langle 1, L_3; \frac{1}{2}, J'_3 | J, J_3 \rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

In der letzten Gleichung ist  $r_B$  der Bohrsche Radius und  $\mathbf{e}_{L_3}$  einer der folgenden sphärischen Basisvektoren

$$\mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_3, \quad \mathbf{e}_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_1 \pm i\mathbf{e}_2) . \quad (\text{B.16})$$

Somit ist  $\mathbf{r}$  im wesentlichen eine Summe über Produkte von CGK, was sich am einfachsten mit einschlägigen Computeralgebra-Programmen berechnen lässt.

Für die Berechnung der Matrix des Operators  $H_{\mathbf{B}}(\mathbf{R})$  benötigen wir die Matrix des Operators des magnetischen Moments  $\boldsymbol{\mu}$  des Elektrons,

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) , \quad (\text{B.17})$$

siehe Gl. (B.6). Die dritte Komponente des magnetischen Moments kann man sofort anschreiben. Man erhält

$$\begin{aligned} & \langle n' L'_J, F', F'_3 | \mu_3 | n L_J, F, F_3 \rangle = -\mu_B \delta_{F'_3, F_3} \delta_{n', n} \delta_{L', L} \sum_{I_3, J_3, L_3, S_3} (L_3 + g S_3) \\ & \times \langle J', J_3; I, I_3 | F', F_3 \rangle \langle L', L_3; \frac{1}{2}, S_3 | J', J_3 \rangle \langle L, L_3; \frac{1}{2}, S_3 | J, J_3 \rangle \langle J, J_3; I, I_3 | F, F_3 \rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Die weiteren Komponenten berechnet man mit Hilfe der Leiteroperatoren für Bahndrehimpuls und Elektronspin. Es ist ([52], Seite 22, Gl. (2.3.1)) für einen allgemeinen Drehimpulsoperator  $\mathbf{J}$

$$J_{\pm} := J_1 \pm iJ_2 , \quad J_1 = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) , \quad J_2 = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-) \quad (\text{B.19})$$

und es zeigt sich, dass für die Matrixelemente der Operatoren  $J_{\pm}$  ([52], Gl. (2.3.16)f.)

$$\langle J', J'_3 | J_{\pm} | J, J_3 \rangle = \sqrt{(J \mp J_3)(J \pm J_3 + 1)} \delta_{J', J} \delta_{J'_3, J_3 \pm 1} =: C_{\pm}(J, J_3) \delta_{J', J} \delta_{J'_3, J_3 \pm 1} \quad (\text{B.20})$$

gilt, wobei wir als Abkürzung die Funktionen  $C_{\pm}(J, J_3)$  definiert haben. Für die Matrixelemente der Operatoren  $J_{1,2}$  folgt also

$$\langle J', J'_3 | J_1 | J, J_3 \rangle = \frac{1}{2} \delta_{J', J} \left( C_+(J, J_3) \delta_{J'_3, J_3+1} + C_-(J, J_3) \delta_{J'_3, J_3-1} \right) , \quad (\text{B.21a})$$

$$\langle J', J'_3 | J_2 | J, J_3 \rangle = \frac{1}{2i} \delta_{J', J} \left( C_+(J, J_3) \delta_{J'_3, J_3+1} - C_-(J, J_3) \delta_{J'_3, J_3-1} \right) . \quad (\text{B.21b})$$

Somit folgt

$$\begin{aligned}
& \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | \mu_1 | n L_J, F, F_3 \rangle \\
&= -\mu_B \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | L_1 + g S_1 | n L_J, F, F_3 \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \mu_B \left( \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | L_+ + L_- | n L_J, F, F_3 \rangle \right. \\
&\quad \left. + g \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | S_+ + S_- | n L_J, F, F_3 \rangle \right)
\end{aligned} \tag{B.22}$$

Die einzelnen Matrixelemente berechnen sich zu

$$\begin{aligned}
& \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | L_\pm | n L_J, F, F_3 \rangle = \delta_{n',n} \delta_{L',L} \delta_{F'_3, F_3 \pm 1} \sum_{I_3, S_3, L_3, J_3} C_\pm(L, L_3) \\
& \times \langle J', J_3 \pm 1; I, I_3 | F', F_3 \pm 1 \rangle \langle L', L_3 \pm 1; \frac{1}{2}, S_3 | J', J_3 \pm 1 \rangle \\
& \times \langle L, L_3; \frac{1}{2}, S_3 | J, J_3 \rangle \langle J, J_3; I, I_3 | F, F_3 \rangle
\end{aligned} \tag{B.23}$$

und

$$\begin{aligned}
& \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | S_\pm | n L_J, F, F_3 \rangle = \delta_{n',n} \delta_{L',L} \delta_{F'_3, F_3 \pm 1} \sum_{I_3, S_3, L_3, J_3} C_\pm(\frac{1}{2}, S_3) \\
& \times \langle J', J_3 \pm 1; I, I_3 | F', F_3 \pm 1 \rangle \langle L', L_3; \frac{1}{2}, S_3 \pm 1 | J', J_3 \pm 1 \rangle \\
& \times \langle L, L_3; \frac{1}{2}, S_3 | J, J_3 \rangle \langle J, J_3; I, I_3 | F, F_3 \rangle .
\end{aligned} \tag{B.24}$$

Wir ersparen uns an dieser Stelle die Angabe des Endresultats nach Einsetzen von (B.23) und (B.24) in (B.22). Die Matrixdarstellung der zweiten Komponente des magnetischen Moments folgt analog aus

$$\begin{aligned}
& \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | \mu_2 | n L_J, F, F_3 \rangle \\
&= -\mu_B \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | L_2 + g S_2 | n L_J, F, F_3 \rangle \\
&= -\frac{1}{2i} \mu_B \left( \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | L_+ - L_- | n L_J, F, F_3 \rangle \right. \\
&\quad \left. + g \langle n' L'_{J'}, F', F'_3 | S_+ - S_- | n L_J, F, F_3 \rangle \right) .
\end{aligned} \tag{B.25}$$

## B.2 Wasserstoff

### B.2.1 Die Massenmatrix im Unterraum mit Hauptquantenzahl $n = 1$

Die Betrachtung des ( $n = 1$ )-Unterraums von Wasserstoff bietet sich als Einführung für den ( $n = 2$ )-Unterraum an. Hier haben wir die denkbar einfachste Situation: Es

gibt keine Metastabilität<sup>1</sup> ( $\Gamma \approx 0$ ) und somit ist die Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}$  hermitesch (und sollte deshalb als Hamiltonoperator bezeichnet werden). Weiterhin gibt es keine nicht-diagonalen Beiträge vom Hyperfeinstruktur-Hamiltonian und keinerlei Beiträge des paritätsverletzenden Hamiltonoperators und des Dipoloperators, da diese nur Zustände mit unterschiedlicher Parität mischen. Wir benötigen hier also nur die Matrixdarstellung des Magnetfeld-Hamiltonoperators  $\underline{H}_{\mathcal{B}}$ .

Der  $(n = 1)$ -Unterraum für Wasserstoff hat die Dimension  $N = 4$ . Der Bahndrehimpuls  $L$  aller Zustände ist Null, der Kernspin ist  $I = \frac{1}{2}$ , womit nur die Gesamtdrehimpulse  $F = 0, 1$  möglich sind. Die Zustände mit  $F = 1$  sind (ohne Magnetfeld) dreifach entartet (symmetrisches Triplet), der Zustand zu  $F = 0$  ist ein Singulett-Zustand.

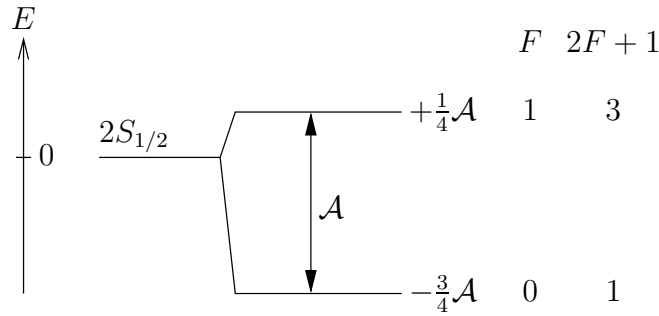


Abbildung B.1: Termschema des Wasserstoff-Grundzustands.

Das zugehörige Termschema ist in Abb. B.1 dargestellt, wobei wir den Schwerpunkt der Energien als Nullpunkt gewählt haben. Die Zustände zu verschiedenen  $F$  sind durch die Hyperfeinaufspaltung<sup>2</sup>

$$\mathcal{A}/h = 1420.405751767 \text{ MHz} \quad (\text{aus [55]}) \quad (\text{B.26})$$

voneinander getrennt ( $h$  = Plancksches Wirkungsquantum). In der Basis (A.27) der Gesamtdrehimpulszustände, die wir absteigend zunächst nach  $F_3$  und dann nach  $F$  sortieren (siehe z.B. Tabelle B.1), lautet die feldfreie Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}_0$  also

$$\underline{\mathcal{M}}_0 = \text{diag} \left( \frac{1}{4}\mathcal{A}, \frac{1}{4}\mathcal{A}, -\frac{3}{4}\mathcal{A}, \frac{1}{4}\mathcal{A} \right) . \quad (\text{B.27})$$

Die auf das Bohrsche Magneton normierte Matrix  $\underline{\mu}_3/\mu_B$  ist in Tabelle B.1 dargestellt, die nun durch das magnetische Feld  $\mathcal{B}(Z)$  ortsabhängig gewordene Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}(Z) = \underline{\mathcal{M}}_0 - \underline{\mu}_3\mathcal{B}(Z)$  findet sich in Tabelle B.2.

<sup>1</sup>Wir vernachlässigen hier den Übergang zwischen den durch die Hyperfeinstruktur getrennten Niveaus. Die zugehörige Lebensdauer der höherliegenden Energieniveaus liegt im Bereich von 10 Millionen Jahren, bzw. es ist  $\Gamma \approx 10^{-15} \text{ s}^{-1}$ .

<sup>2</sup>Die zitierten Quellen für die in dieser Arbeit verwendeten experimentell gemessenen Aufspaltungen der Energieniveaus von Wasserstoff und Deuterium sind oft sehr alt, aber immer noch aktuell. Einen guten Überblick über die experimentellen Werte auf dem Stand von 1990 bietet das Buch von Kinoshita [53], Kap. 13 und 14, dass auch von neueren Arbeiten noch zitiert wird, siehe z.B. [54], wo eine neue Messung der 2S-Hyperfeinaufspaltung vorgestellt wird.

	$1S_{1/2}$ 1, 1	$1S_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0	$1S_{1/2}$ 1, -1
$1S_{1/2}, 1, 1$	$-\frac{g}{2}$	0	0	0
$1S_{1/2}, 1, 0$	0	0	$-\frac{g}{2}$	0
$1S_{1/2}, 0, 0$	0	$-\frac{g}{2}$	0	0
$1S_{1/2}, 1, -1$	0	0	0	$\frac{g}{2}$

**Tabelle B.1:** Die Matrix der dritten Komponente des magn. Moments  $\underline{\mu}_3/\mu_B$ , normiert auf das Bohrsche Magneton. Es ist  $g = 2.0023$  der Landé-Faktor des Elektrons

	$1S_{1/2}$ 1, 1	$1S_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0	$1S_{1/2}$ 1, -1
$1S_{1/2}, 1, 1$	$\frac{1}{4}\mathcal{A} + \frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B}(Z)$	0	0	0
$1S_{1/2}, 1, 0$	0	$\frac{1}{4}\mathcal{A}$	$\frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B}(Z)$	0
$1S_{1/2}, 0, 0$	0	$\frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B}(Z)$	$-\frac{3}{4}\mathcal{A}$	0
$1S_{1/2}, 1, -1$	0	0	0	$\frac{1}{4}\mathcal{A} - \frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B}(Z)$

**Tabelle B.2:** Die Massenmatrix  $\mathcal{M}(z)$ .

$\alpha$	$F$	$F_3$	$E_\alpha(Z)$	$ \alpha(Z)\rangle =$
1	1	1	$\frac{1}{4}\mathcal{A}(1 + 4\hat{b}(Z))$	$ 1S_{1/2}, 1, 1\rangle$
2	1	0	$-\frac{1}{4}\mathcal{A}(1 - 2\sqrt{h(Z)})$	$\mathcal{N}_+(Z) (c_+(Z) 1S_{1/2}, 1, 0\rangle +  1S_{1/2}, 0, 0\rangle)$
3	1	-1	$\frac{1}{4}\mathcal{A}(1 - 4\hat{b}(Z))$	$ 1S_{1/2}, 1, -1\rangle$
4	0	0	$-\frac{1}{4}\mathcal{A}(1 + 2\sqrt{h(Z)})$	$\mathcal{N}_-(Z) (c_-(Z) 1S_{1/2}, 1, 0\rangle +  1S_{1/2}, 0, 0\rangle)$

**Tabelle B.3:** Eigenwerte und Eigenvektoren der Massenmatrix  $\mathcal{M}(Z)$ . Man beachte, dass  $F$  für die  $|\alpha(Z)\rangle$  i.A. keine gute Quantenzahl mehr ist.

Die Berechnung der Eigenvektoren und Eigenwerte gestaltet sich in diesem Fall sehr einfach. In Tabelle B.3 sind die Ergebnisse dargestellt, dabei ist zu beachten, dass die Reihenfolge der Vektoren etwas anders gewählt wurde als bisher. Die Nummerierung entspricht nun der in [13] verwendeten Konvention.

In Tabelle B.3 wurden die folgenden Abkürzungen verwendet:

$$\hat{b}(Z) := \frac{1}{2}g\mu_B\mathcal{B}(Z)/\mathcal{A}, \quad (\text{B.28})$$

$$h(Z) := 1 + 4\hat{b}^2(Z), \quad (\text{B.29})$$

$$c_{\pm}(Z) := \frac{1 \pm \sqrt{h(Z)}}{2\hat{b}(Z)}, \quad (\text{B.30})$$

$$\mathcal{N}_{\pm}(Z) := \sqrt{\frac{2\hat{b}^2(Z)}{h(Z) \pm \sqrt{h(Z)}}}. \quad (\text{B.31})$$

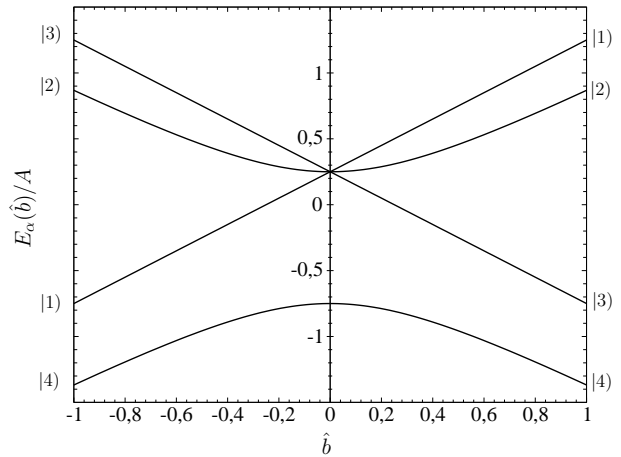
Mit den berechneten Eigenenergien im Magnetfeld ergibt sich das in Abb. B.2 dargestellte Breit-Rabi-Diagramm. Man erkennt den Übergang zwischen dem Zeeman-Bereich, wo sich die Energien der Zustände mit  $\alpha = 2, 4$  quadratisch mit  $\hat{b}$  ändern, und dem Paschen-Back-Bereich, wo sich die Energien aller Zustände linear mit  $\hat{b}$  ändern. An der Stelle  $\hat{b} \approx 0.5$ , wo etwa die Grenze dieser Bereich liegt, definiert man das sog. kritische Magnetfeld, was hier einen Wert

$$\mathcal{B}_{\text{krit.}} = \frac{\mathcal{A}}{g\mu_B} \approx 50 \text{ mT} \quad (\text{B.32})$$

hat.

Nun berechnen wir Ableitungsmatrizen  $\underline{\mathcal{D}}^{(1,2)}(Z)$ , die in (6.31), (6.32) definiert wurden. Es bietet sich dabei die in Anhang A.4 dargestellte Vorgehensweise an. Hierzu benötigen wir jedoch zunächst die Matrixdarstellung von  $\partial_Z \underline{\mathcal{M}}(Z)$  bezüglich der lokalen Eigenvektoren  $|\alpha(Z)\rangle$ . Eine Unterscheidung zwischen linken und rechten Eigenvektoren gibt es dabei in diesem Fall nicht. Die Darstellung von  $(\partial_Z \underline{\mathcal{M}}(Z))$  in der Basis  $\{|1S_{1/2}, F, F_3\rangle\}$  der Gesamtdrehimpulszustände aus Gl. A.27 ergibt sich sofort aus Tabelle B.2, sie kann in Tabelle B.4 abgelesen werden (für  $k = 1$ ).

Die Berechnung von  $\underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z)$  erfolgt nun durch zweifaches Einschreiben der Basis



**Abbildung B.2:** Breit-Rabi-Diagramm für Wasserstoff im  $(n = 1)$ -Unterraum

$\{|1S_{1/2}, F, F_3\rangle\}$  in den Ausdruck (6.31):

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{D}}_{\beta\alpha}^{(1)}(Z) &\stackrel{\beta \neq \alpha}{=} \sum_{F, F', F_3, F'_3} (\beta(Z) | 1S_{1/2}, F', F'_3 \rangle \langle 1S_{1/2}, F, F_3 | \alpha(Z)) \\ &\times \frac{\langle 1S_{1/2}, F', F'_3 | (\partial_Z \mathcal{M}(Z)) | 1S_{1/2}, F, F_3 \rangle}{E_\alpha(Z) - E_\beta(Z)} \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Mit den Definitionen der Zustände  $|\alpha(Z)\rangle$  aus Tabelle B.3 ergibt sich nach einiger Rechnung das in Tabelle B.5 dargestellte Ergebnis.

Desweiteren erhält man mit der Formel (A.94),  $\underline{\mathcal{D}}^{(1)}(Z)$  aus Tabelle B.5 und mit Tabelle B.4 ( $k = 2$ ),  $\underline{\mathcal{D}}^{(2)}(Z)$  wie in Tabelle B.6 dargestellt.

	$1S_{1/2}$ 1, 1	$1S_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0	$1S_{1/2}$ 1, -1
$1S_{1/2}, 1, 1$	$\frac{1}{2}g\mu_B \mathcal{B}^{(k)}(Z)$	0	0	0
$1S_{1/2}, 1, 0$	0	0	$\frac{1}{2}g\mu_B \mathcal{B}^{(k)}(Z)$	0
$1S_{1/2}, 0, 0$	0	$\frac{1}{2}g\mu_B \mathcal{B}^{(k)}(Z)$	0	0
$1S_{1/2}, 1, -1$	0	0	0	$\frac{1}{2}g\mu_B \mathcal{B}^{(k)}(Z)$

**Tabelle B.4:** Die  $k$ -fach abgeleitete Massenmatrix  $\partial_Z^k \mathcal{M}(Z)$ .  $\mathcal{B}^{(k)}(Z)$  steht für die  $k$ -te Ableitung des Magnetfelds nach  $Z$ .

$\beta \backslash \alpha$	1	2	3	4
1	0	0	0	0
2	0	0	0	$-\frac{\hat{b}'(Z)}{h(Z)} \frac{ \hat{b}(Z) }{\hat{b}(Z)}$
3	0	0	0	0
4	0	$\frac{\hat{b}'(Z)}{h(Z)} \frac{ \hat{b}(Z) }{\hat{b}(Z)}$	0	0

**Tabelle B.5:** Die Matrix  $\underline{\mathcal{D}}^{(1)}(Z)$  in der Darstellung der Basis der lokalen Eigenzustände von  $\mathcal{M}(Z)$ .

$\beta \backslash \alpha$	1	2	3	4
1	0	0	0	0
2	0	$2 \left( \frac{\dot{b}(Z)}{h(Z)} \right)^2$	0	$\left( 8\hat{b}(Z) \left( \frac{\dot{b}(Z)}{h(Z)} \right)^2 - \frac{\dot{b}''(Z)}{h(Z)} \right) \frac{ \dot{b}(Z) }{\dot{b}(Z)}$
3	0	0	0	0
4	0	$-\left( 8\hat{b}(Z) \left( \frac{\dot{b}(Z)}{h(Z)} \right)^2 - \frac{\dot{b}''(Z)}{h(Z)} \right) \frac{ \dot{b}(Z) }{\dot{b}(Z)}$	0	$2 \left( \frac{\dot{b}(Z)}{h(Z)} \right)^2$

**Tabelle B.6:** Die Matrix  $\underline{\mathcal{D}}^{(2)}(Z)$  in der Darstellung der Basis der lokalen Eigenzustände von  $\underline{\mathcal{M}}(Z)$ .

### B.2.2 Die Massenmatrix im Unterraum mit Hauptquantenzahl $n = 2$

Der  $(n = 2)$ -Unterraum für Wasserstoff ist 16-dimensional. Der maximale Gesamtdrehimpuls wird im Zustand  $2P_{3/2}$  mit  $F = 2$  erreicht. Die  $2P$ -Zustände mit unterschiedlichem  $J$  sind durch die Feinstruktur  $\Delta$ , die  $2S_{1/2}$ - und die  $2P_{1/2}$  sind durch die Lamb-Verschiebung  $\mathcal{S}$  voneinander getrennt. Die experimentellen Werte für diese Energien lauten

$$\mathcal{S}/h = 1057.8514(19) \text{ MHz} \quad (\text{aus [56]}) , \quad (\text{B.34})$$

$$\Delta/h = 10969.127(95) \text{ MHz} \quad (\text{aus [57]}) . \quad (\text{B.35})$$

Die Hyperfeinaufspaltungen der Zustände mit den Quantenzahlen  $2S_{1/2}$ ,  $2P_{1/2}$  und  $2P_{3/2}$  können aus der Hyperfeinaufspaltung  $\mathcal{A}$  des Grundzustands berechnet werden. Die hierfür verwendete Formel, die aus den Ergebnissen aus [50], S. 110, abgeleitet werden kann, lautet

$$\mathcal{A}(I, nL_J) = \frac{3}{2n^3(2L+1)(J+1)} \frac{f(I, 1/2)}{f(I, J)} \mathcal{A} , \quad f(I, J) = \begin{cases} I + \frac{1}{2} & J \leq I \\ \frac{I(J+\frac{1}{2})}{J} & J \geq I \end{cases} . \quad (\text{B.36})$$

Für Wasserstoff mit Kernspin  $I = \frac{1}{2}$  ergeben sich damit die in Tab. B.7 angegebenen Werte.

$nL_J$	$1S_{1/2}$	$2S_{1/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$
$\mathcal{A}(\frac{1}{2}, nL_J)$	$\mathcal{A} = 1420.4 \text{ MHz } h$	$\frac{1}{8}\mathcal{A}$	$\frac{1}{24}\mathcal{A}$	$\frac{1}{60}\mathcal{A}$

**Tabelle B.7:** Skalierung der Hyperfeinaufspaltung für Wasserstoff mit  $n \leq 2$ .

Die  $(n = 2)$ -Zustände zerfallen auf unterschiedliche Weise in die  $(n = 1)$ -Grundzustände: Die  $2P_J$ -Zustände gehen hauptsächlich durch spontane Emission eines Photons (E1-Über-

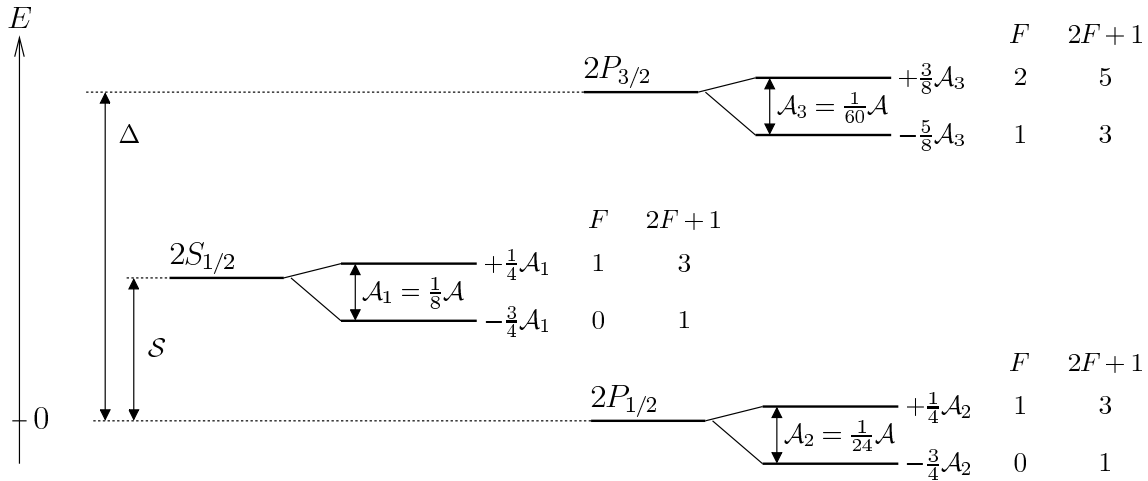
gang) in die  $1S_{1/2}$ -Zustände über, die  $2S_{1/2}$ -Zustände dagegen sind metastabil und gehen hauptsächlich durch den selteneren zwei-Photon-Zerfall (2E1-Übergang) in den Grundzustand über. Die mittleren Lebensdauern  $\tau_{S,P}$ , bzw. die totalen Zerfallsbreiten  $\Gamma_{S,P} = \tau_{S,P}^{-1}$ , sind daher für beide Zustandsgruppen stark unterschiedlich und lauten:

$$\Gamma_P/\hbar = \tau_P^{-1} = \Gamma(2P \rightarrow 1S + \gamma)(1 + \mathcal{O}(\alpha_{\text{em}})) = (1.6 \cdot 10^{-9} \text{ s})^{-1} \quad (\text{aus [50]}) , \quad (\text{B.37})$$

$$\Gamma_S/\hbar = \tau_S^{-1} = \Gamma(2S \rightarrow 1S + 2\gamma)(1 + \mathcal{O}(\alpha_{\text{em}})) = (0.1215 \text{ s})^{-1} \quad (\text{aus [58]}) . \quad (\text{B.38})$$

Insgesamt ergibt sich damit das in Abb. B.3 dargestellte Termschema. Die freie Massenmatrix  $\mathcal{M}_0$  ist in den Tabellen B.8a bis B.8c angegeben. Die Tabellen B.9, B.10 und B.11 enthalten die Matrixdarstellungen der drei Komponenten des Operators des (auf das Bohrsche Magneton  $\mu_B$  normierten) magnetischen Moments  $\underline{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)$ . Während die Matrix  $\underline{\mu}_3$  blockdiagonal bzgl. der dritten Komponente  $F_3$  des Gesamtdrehimpulses ist, sind in  $\underline{\mu}_1$  und  $\underline{\mu}_2$  die nebendiagonalen Blöcke besetzt. Eine Übersicht über die Gestalt der Matrizen findet sich in den Tabellen B.9a und B.10a. Nach demselben Schema geben wir in den Tabellen B.12 und B.13 die Matrixdarstellungen der (auf  $er_B$  normierten) ersten beiden Komponenten des Dipoloperators  $\underline{D} = (\underline{D}_1, \underline{D}_2, \underline{D}_3)$  an. Die dritte Komponente  $\underline{D}_3$  ist in Tabelle B.14 dargestellt.

Die Lösung des Eigenwertproblems der Massenmatrix und damit auch die Angabe der lokal definierten Ableitungsmatrizen  $\underline{\mathcal{Q}}^{(1,2)}(Z)$  ist hier im Gegensatz zum Unterraum mit Hauptquantenzahl  $n = 1$  nur noch numerisch möglich.



**Abbildung B.3:** Termschema der  $(n = 2)$ -Zustände von Wasserstoff (nicht maßstabsgetreu).



	$2P_{3/2}$ 2, 2	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{160}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, 2, 1$	0	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{160}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0
$2P_{3/2}, 1, 1$	0	0	$\Delta - \frac{\mathcal{A}}{96}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\mathcal{A}}{192\sqrt{2}}$	0
$2P_{1/2}, 1, 1$	0	0	$-\frac{\mathcal{A}}{192\sqrt{2}}$	$\frac{\mathcal{A}}{96} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S}$ $+\frac{i}{2}\delta_2\mathcal{S}$
$2S_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S}$ $-\frac{i}{2}\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{\mathcal{A}}{32}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_S$

(B.8a)

**Tabelle B.8:** Die freie, nichthermitesche Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}_0$  für Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum  $(F_3 = 2, 1)$ .

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2P_{3/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 0$	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{160}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0	0
$2P_{3/2}, 1, 0$	0	$\Delta - \frac{\mathcal{A}}{96}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\mathcal{A}}{192\sqrt{2}}$	0	0	0
$2P_{1/2}, 1, 0$	0	$-\frac{\mathcal{A}}{192\sqrt{2}}$	$\frac{\mathcal{A}}{96} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S}$ $+\frac{i}{2}\delta_2\mathcal{S}$	0	0
$2S_{1/2}, 1, 0$	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S}$ $-\frac{i}{2}\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{\mathcal{A}}{32}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_S$	0	0
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	0	$-\frac{\mathcal{A}}{32} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S}$ $-\frac{3}{2}i\delta_2\mathcal{S}$
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S}$ $-\frac{3}{2}i\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} - \frac{3\mathcal{A}}{32}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_S$

(B.8b)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1	$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, -1$	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{160}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, 1, -1$	0	$\Delta - \frac{\mathcal{A}}{96}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\mathcal{A}}{192\sqrt{2}}$	0	0
$2P_{1/2}, 1, -1$	0	$-\frac{\mathcal{A}}{192\sqrt{2}}$	$\frac{\mathcal{A}}{96} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S}$ $+\frac{i}{2}\delta_2\mathcal{S}$	0
$2S_{1/2}, 1, -1$	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S}$ $-\frac{i}{2}\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{\mathcal{A}}{32}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_S$	0
$2P_{3/2}, 2, -2$	0	0	0	0	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{160}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$

(B.8c)

**Tabelle B.8:** Die freie, nichtthermitesche Massenmatrix  $\mathcal{M}_0$  für Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum ( $F_3 = 0, -1, -2$ ).

$F'_3 \setminus F_3$	2	1	0	-1	-2
2	0	B.9b	0	0	0
1	(B.9b) <sup>†</sup>	0	B.9c	0	0
0	0	(B.9c) <sup>†</sup>	0	B.9d	0
-1	0	0	(B.9d) <sup>†</sup>	0	B.9e
-2	0	0	0	(B.9e) <sup>†</sup>	0

**(B.9a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{\mu}_1$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	$-\frac{g+2}{4}$	$\frac{g+2}{4\sqrt{3}}$	$-\frac{g-1}{\sqrt{6}}$	0

**(B.9b)**

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 1$	$-\frac{g+2}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\frac{g+2}{4\sqrt{6}}$	$-\frac{g-1}{2\sqrt{3}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, 1, 1$	$-\frac{g+2}{12\sqrt{2}}$	$-\frac{5(g+2)}{12\sqrt{2}}$	$\frac{1-g}{6}$	0	$\frac{1-g}{3}$	0
$2P_{1/2}, 1, 1$	$\frac{g-1}{6}$	$\frac{1-g}{6}$	$\frac{g-4}{6\sqrt{2}}$	0	$-\frac{g-4}{6\sqrt{2}}$	0
$2S_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	$-\frac{g}{2\sqrt{2}}$	0	$\frac{g}{2\sqrt{2}}$

**(B.9c)**

**Tabelle B.9:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_1$  der ersten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1		$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, 0$	$-\frac{g+2}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\frac{g+2}{12\sqrt{2}}$	$\frac{1-g}{6}$	0	$2P_{3/2}, 2, -1$	$-\frac{g+2}{4}$
$2P_{3/2}, 1, 0$	$-\frac{g+2}{4\sqrt{6}}$	$-\frac{5(g+2)}{12\sqrt{2}}$	$\frac{1-g}{6}$	0	$2P_{3/2}, 1, -1$	$-\frac{g+2}{4\sqrt{3}}$
$2P_{1/2}, 1, 0$	$\frac{g-1}{2\sqrt{3}}$	$\frac{1-g}{6}$	$\frac{g-4}{6\sqrt{2}}$	0	$2P_{1/2}, 1, -1$	$\frac{g-1}{\sqrt{6}}$
$2S_{1/2}, 1, 0$	0	0	0	$-\frac{g}{2\sqrt{2}}$	$2S_{1/2}, 1, -1$	0
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	$\frac{g-1}{3}$	$\frac{g-4}{6\sqrt{2}}$	0		
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	$-\frac{g}{2\sqrt{2}}$		

(B.9d)

(B.9e)

**Tabelle B.9:** (Fortsetzung) Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_1$  der ersten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum.

$F'_3 \setminus F_3$	2	1	0	-1	-2
2	0	B.10b	0	0	0
1	(B.10b) $^\dagger$	0	B.10c	0	0
0	0	(B.10c) $^\dagger$	0	B.10d	0
-1	0	0	(B.10d) $^\dagger$	0	B.10e
-2	0	0	0	(B.10e) $^\dagger$	0

**(B.10a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{\mu}_2$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

**Tabelle B.10:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_2$  der zweiten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	$\frac{i(g+2)}{4}$	$-\frac{i(g+2)}{4\sqrt{3}}$	$\frac{i(g-1)}{\sqrt{6}}$	0

(B.10b)

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 1$	$\frac{i(g+2)}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}$	$-\frac{i(g+2)}{4\sqrt{6}}$	$\frac{i(g-1)}{2\sqrt{3}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, 1, 1$	$\frac{i(g+2)}{12\sqrt{2}}$	$\frac{5i(g+2)}{12\sqrt{2}}$	$\frac{i(g-1)}{6}$	0	$\frac{i(g-1)}{3}$	0
$2P_{1/2}, 1, 1$	$-\frac{i(g-1)}{6}$	$\frac{i(g-1)}{6}$	$-\frac{i(g-4)}{6\sqrt{2}}$	0	$\frac{i(g-4)}{6\sqrt{2}}$	0
$2S_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	$\frac{ig}{2\sqrt{2}}$	0	$-\frac{ig}{2\sqrt{2}}$

(B.10c)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1
$2P_{3/2}, 2, 0$	$\frac{i(g+2)}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}$	$-\frac{i(g+2)}{12\sqrt{2}}$	$\frac{i(g-1)}{6}$	0
$2P_{3/2}, 1, 0$	$\frac{i(g+2)}{4\sqrt{6}}$	$\frac{5i(g+2)}{12\sqrt{2}}$	$\frac{i(g-1)}{6}$	0
$2P_{1/2}, 1, 0$	$-\frac{i(g-1)}{2\sqrt{3}}$	$\frac{i(g-1)}{6}$	$-\frac{i(g-4)}{6\sqrt{2}}$	0
$2S_{1/2}, 1, 0$	0	0	0	$\frac{ig}{2\sqrt{2}}$
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	$-\frac{i(g-1)}{3}$	$-\frac{i(g-4)}{6\sqrt{2}}$	0
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	$\frac{ig}{2\sqrt{2}}$

(B.10d)

	$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, -1$	$\frac{i(g+2)}{4}$
$2P_{3/2}, 1, -1$	$\frac{i(g+2)}{4\sqrt{3}}$
$2P_{1/2}, 1, -1$	$-\frac{i(g-1)}{\sqrt{6}}$
$2S_{1/2}, 1, -1$	0

(B.10e)

**Tabelle B.10:** (Fortsetzung) Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_2$  der zweiten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im  $(n=2)$ -Unterraum.

	$2P_{3/2}$ 2, 2	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	$-\frac{2+g}{2}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, 2, 1$	0	$-\frac{2+g}{4}$	$-\frac{2+g}{4\sqrt{3}}$	$\frac{1-g}{\sqrt{6}}$	0
$2P_{3/2}, 1, 1$	0	$-\frac{2+g}{4\sqrt{3}}$	$-\frac{5(2+g)}{12}$	$-\frac{1-g}{3\sqrt{2}}$	0
$2P_{1/2}, 1, 1$	0	$\frac{1-g}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1-g}{3\sqrt{2}}$	$-\frac{4-g}{6}$	0
$2S_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	0	$-\frac{g}{2}$

(B.11a)

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 0$	0	$-\frac{2+g}{6}$	$\frac{\sqrt{2}(1-g)}{3}$	0	0	0
$2P_{3/2}, 1, 0$	$-\frac{2+g}{6}$	0	0	0	$\frac{\sqrt{2}(1-g)}{3}$	0
$2P_{1/2}, 1, 0$	$\frac{\sqrt{2}(1-g)}{3}$	0	0	0	$-\frac{4-g}{6}$	0
$2S_{1/2}, 1, 0$	0	0	0	0	0	$-\frac{g}{2}$
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	$\frac{\sqrt{2}(1-g)}{3}$	$-\frac{4-g}{6}$	0	0	0
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	$-\frac{g}{2}$	0	0

(B.11b)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1	$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, -1$	$\frac{2+g}{4}$	$-\frac{2+g}{4\sqrt{3}}$	$\frac{1-g}{\sqrt{6}}$	0	0
$2P_{3/2}, 1, -1$	$-\frac{2+g}{4\sqrt{3}}$	$\frac{5(2+g)}{12}$	$\frac{1-g}{3\sqrt{2}}$	0	0
$2P_{1/2}, 1, -1$	$\frac{1-g}{\sqrt{6}}$	$\frac{1-g}{3\sqrt{2}}$	$\frac{4-g}{6}$	0	0
$2S_{1/2}, 1, -1$	0	0	0	$\frac{g}{2}$	0
$2P_{3/2}, 2, -2$	0	0	0	0	$\frac{2+g}{2}$

(B.11c)

**Tabelle B.11:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_3$  der dritten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im ( $n = 2$ )-Unterraum.

$F'_3 \setminus F_3$	2	1	0	-1	-2
2	0	B.12b	0	0	0
1	(B.12b) <sup>†</sup>	0	B.12c	0	0
0	0	(B.12c) <sup>†</sup>	0	B.12d	0
-1	0	0	(B.12d) <sup>†</sup>	0	B.12e
-2	0	0	0	(B.12e) <sup>†</sup>	0

**(B.12a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{D}_1$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	0	0	0	$-\frac{3}{\sqrt{2}}$

**(B.12b)**

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 1$	0	0	0	$-\frac{3}{2}$	0	0
$2P_{3/2}, 1, 1$	0	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	$-\sqrt{3}$
$2P_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$	0	$\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2S_{1/2}, 1, 1$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$	0	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	0

**(B.12c)**

**Tabelle B.12:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_1$  der ersten Komponente des Dipolmoments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1
$2P_{3/2}, 2, 0$	0	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$
$2P_{3/2}, 1, 0$	0	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$
$2P_{1/2}, 1, 0$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2S_{1/2}, 1, 0$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$	0
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$	0

(B.12d)

	$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, -1$	0
$2P_{3/2}, 1, -1$	0
$2P_{1/2}, 1, -1$	0
$2S_{1/2}, 1, -1$	$\frac{3}{\sqrt{2}}$

(B.12e)

**Tabelle B.12:** (Fortsetzung) Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_1$  der ersten Komponente des Dipolmoments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum.

$F'_3 \backslash F_3$	2	1	0	-1	-2
2	0	B.13b	0	0	0
1	(B.13b) $^\dagger$	0	B.13c	0	0
0	0	(B.13c) $^\dagger$	0	B.13d	0
-1	0	0	(B.13d) $^\dagger$	0	B.13e
-2	0	0	0	(B.13e) $^\dagger$	0

**(B.13a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{D}_2$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

**Tabelle B.13:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_2$  der zweiten Komponente des Dipolmoments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)



	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	0	0	0	$\frac{3i}{\sqrt{2}}$

(B.13b)

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 1$	0	0	0	$\frac{3i}{2}$	0	0
$2P_{3/2}, 1, 1$	0	0	0	$\frac{i\sqrt{3}}{2}$	0	$i\sqrt{3}$
$2P_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	$i\sqrt{\frac{3}{2}}$	0	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2S_{1/2}, 1, 1$	$-\frac{i\sqrt{3}}{2}$	$\frac{i\sqrt{3}}{2}$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}$	0	$-i\sqrt{\frac{3}{2}}$	0

(B.13c)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1
$2P_{3/2}, 2, 0$	0	0	0	$\frac{i\sqrt{3}}{2}$
$2P_{3/2}, 1, 0$	0	0	0	$\frac{i\sqrt{3}}{2}$
$2P_{1/2}, 1, 0$	0	0	0	$i\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2S_{1/2}, 1, 0$	$-\frac{3i}{2}$	$\frac{i\sqrt{3}}{2}$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}$	0
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	$i\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	$-i\sqrt{3}$	$i\sqrt{\frac{3}{2}}$	0

(B.13d)

	$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, -1$	0
$2P_{3/2}, 1, -1$	0
$2P_{1/2}, 1, -1$	0
$2S_{1/2}, 1, -1$	$-\frac{3i}{\sqrt{2}}$

(B.13e)

**Tabelle B.13:** (Fortsetzung) Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_2$  der zweiten Komponente des Dipolmoments von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum.

	$2P_{3/2}$ 2, 2	$2P_{3/2}$ 2, 1	$2P_{3/2}$ 1, 1	$2P_{1/2}$ 1, 1	$2S_{1/2}$ 1, 1
$2P_{3/2}, 2, 2$	0	0	0	0	0
$2P_{3/2}, 2, 1$	0	0	0	0	$\frac{3}{\sqrt{2}}$
$2P_{3/2}, 1, 1$	0	0	0	0	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$
$2P_{1/2}, 1, 1$	0	0	0	0	$-\sqrt{3}$
$2S_{1/2}, 1, 1$	0	$\frac{3}{\sqrt{2}}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}$	$-\sqrt{3}$	0

(B.14a)

	$2P_{3/2}$ 2, 0	$2P_{3/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 1, 0	$2S_{1/2}$ 1, 0	$2P_{1/2}$ 0, 0	$2S_{1/2}$ 0, 0
$2P_{3/2}, 2, 0$	0	0	0	$\sqrt{6}$	0	0
$2P_{3/2}, 1, 0$	0	0	0	0	0	$\sqrt{6}$
$2P_{1/2}, 1, 0$	0	0	0	0	0	$-\sqrt{3}$
$2S_{1/2}, 1, 0$	$\sqrt{6}$	0	0	0	$-\sqrt{3}$	0
$2P_{1/2}, 0, 0$	0	0	0	$-\sqrt{3}$	0	0
$2S_{1/2}, 0, 0$	0	$\sqrt{6}$	$-\sqrt{3}$	0	0	0

(B.14b)

	$2P_{3/2}$ 2, -1	$2P_{3/2}$ 1, -1	$2P_{1/2}$ 1, -1	$2S_{1/2}$ 1, -1	$2P_{3/2}$ 2, -2
$2P_{3/2}, 2, -1$	0	0	0	$\frac{3}{\sqrt{2}}$	0
$2P_{3/2}, 1, -1$	0	0	0	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	0
$2P_{1/2}, 1, -1$	0	0	0	$\sqrt{3}$	0
$2S_{1/2}, 1, -1$	$\frac{3}{\sqrt{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{3}$	0	0
$2P_{3/2}, 2, -2$	0	0	0	0	0

(B.14c)

**Tabelle B.14:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_3$  der dritten Komponente des Dipoloperators von Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum.

### B.2.3 Numerische Berechnung der Eigenwerte in elektrischen und magnetischen Feldern

Mit den expliziten Matrizen aus dem letzten Abschnitt ist es uns nun möglich, die Eigenwerte bei vorhandenen äußeren Feldern numerisch zu berechnen. Wir betrachten exemplarisch in 3-Richtung orientierte, statische Felder  $\mathcal{E} = \mathcal{E} \cdot \mathbf{e}_3$  und  $\mathcal{B} = \mathcal{B} \cdot \mathbf{e}_3$ .

In einem rein magnetischen Feld tritt keine Mischung von Zuständen unterschiedlicher Bahndrehimpulse auf, also bleiben die Lebensdauern der  $2P$ - und  $2S$ -Zustände konstant. Die Realteile der Eigenwerte liefern uns dagegen die Breit-Rabi-Diagramme, Abb. B.4. Die Reihenfolge der Energien für ein kleines, positives Magnetfeld in 3-Richtung entspricht für Wasserstoff der Reihenfolge der Durchnummerierung aus Tabelle B.15<sup>3</sup>. Im Falle allgemeiner elektrischer und magnetischer Felder sind in der Notation aus Tab. B.15 die Buchstaben  $\mathcal{E}$  und  $\mathcal{B}$  durch die Vektoren  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  und  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  zu ersetzen.

$\alpha$	$ 2\hat{L}_J, F, F_3, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	$\alpha$	$ 2\hat{L}_J, F, F_3, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
1	$ 2\hat{P}_{3/2}, 2, 2, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	9	$ 2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
2	$ 2\hat{P}_{3/2}, 2, 1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	10	$ 2\hat{S}_{1/2}, 1, 0, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
3	$ 2\hat{P}_{3/2}, 2, 0, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	11	$ 2\hat{S}_{1/2}, 1, -1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
4	$ 2\hat{P}_{3/2}, 2, -1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	12	$ 2\hat{S}_{1/2}, 0, 0, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
5	$ 2\hat{P}_{3/2}, 2, -2, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	13	$ 2\hat{P}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
6	$ 2\hat{P}_{3/2}, 1, 1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	14	$ 2\hat{P}_{1/2}, 1, 0, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
7	$ 2\hat{P}_{3/2}, 1, 0, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	15	$ 2\hat{P}_{1/2}, 1, -1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
8	$ 2\hat{P}_{3/2}, 1, -1, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	16	$ 2\hat{P}_{1/2}, 0, 0, \mathcal{E}, \mathcal{B})$

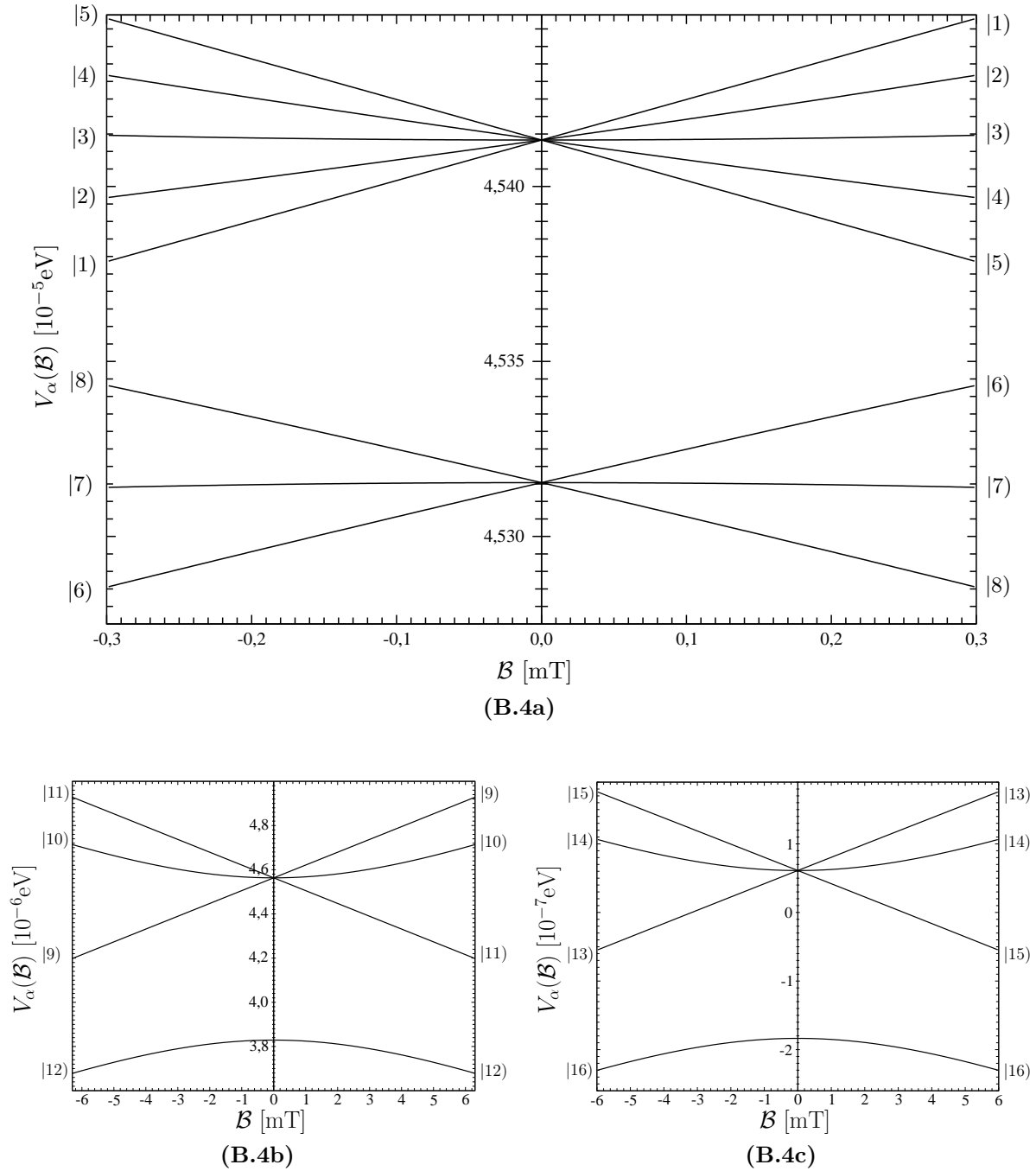
**Tabelle B.15:** Zuordnung der verschiedenen Notationen für Wasserstoff im  $(n = 2)$ -Unterraum. Die Reihenfolge der Zustände wurde absteigend nach den ungestörten Energien und innerhalb eines Multipletts absteigend nach  $F$  und  $F_3$  gewählt.

Das Breit-Rabi-Diagramm der  $2P_{3/2}$ -Zustände ist in Abb. B.5 noch einmal bis zu einem etwas größeren Magnetfeld dargestellt. Man sieht dort, dass bereits ab  $|\mathcal{B}| \approx 0.5 \text{ mT}$  eine Überschneidung der Energien verschiedener Zustände auftritt.

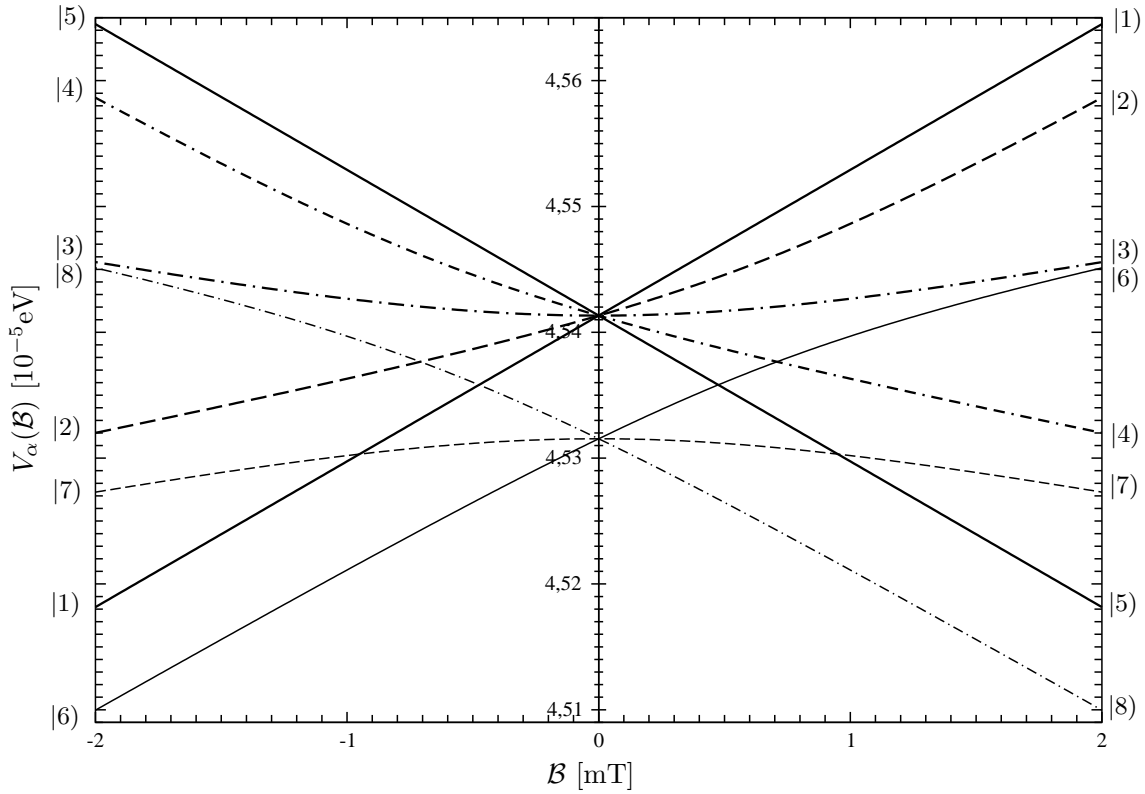
Die kritischen Magnetfelder, die aus den Breit-Rabi-Diagrammen entnommen werden

---

<sup>3</sup>Dies wird für Deuterium nicht mehr der Fall sein, wie in Abschnitt B.3.2 gezeigt wird.



**Abbildung B.4:** Breit-Rabi-Diagramme für Wasserstoff im ( $n = 2$ )-Unterraum. Die Bedeutung der mit  $|\alpha\rangle$ , ( $\alpha = 1, \dots, 16$ ), bezeichneten Zustände kann Tabelle B.15 entnommen werden.



**Abbildung B.5:** Breit-Rabi-Diagramm für die  $2P_{3/2}$ -Zustände von Wasserstoff. Gegenüber Abb. B.4a ist hier ein größeres Magnetfeldintervall dargestellt.

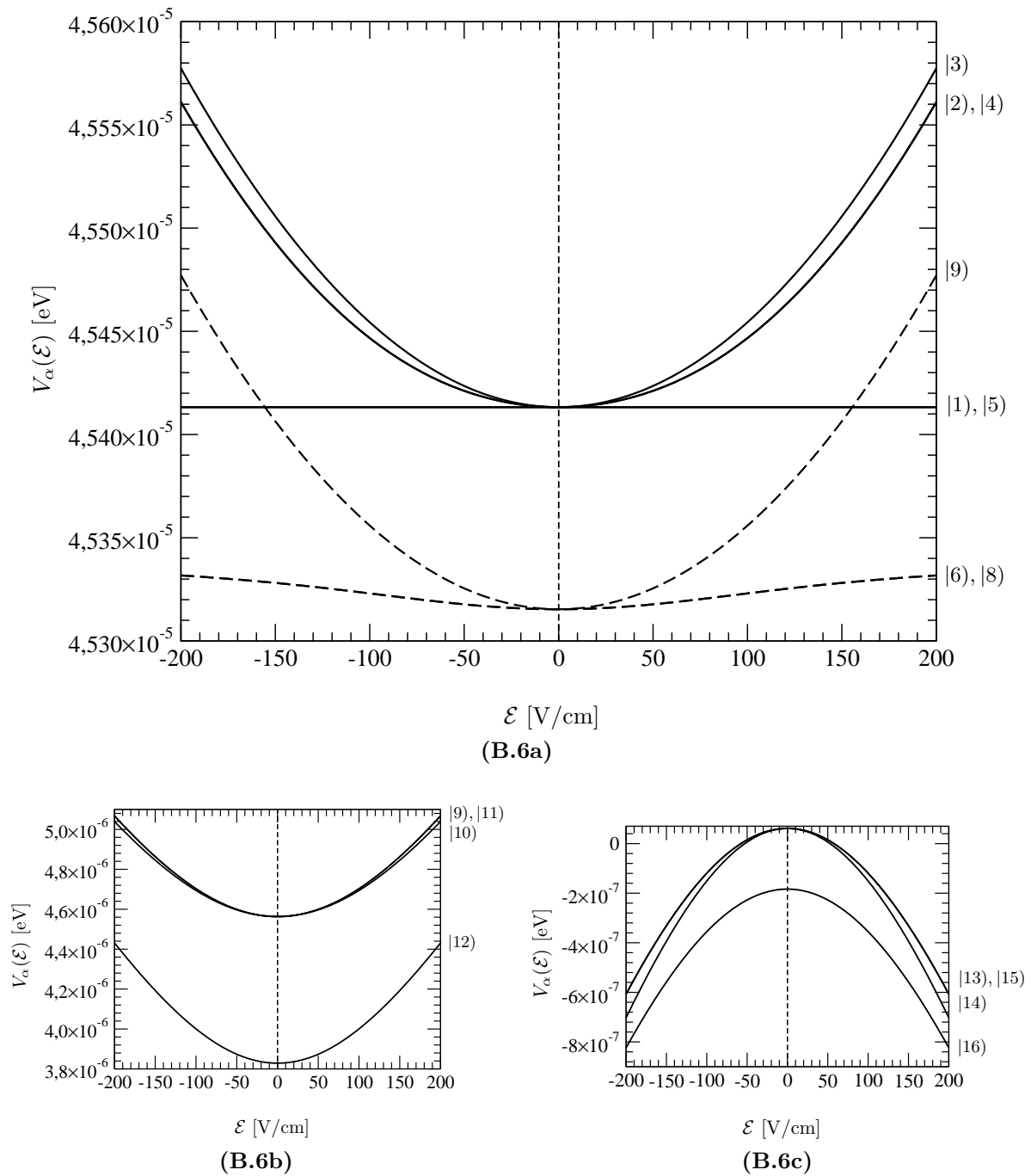
können, liegen bei etwa

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\text{krit.}}(2S_{1/2}) &\approx \mathcal{B}_{\text{krit.}}(2P_{1/2}) \approx 6 \text{ mT} , \\ \mathcal{B}_{\text{krit.}}(2P_{3/2}) &\approx 2 \text{ mT} , \end{aligned} \tag{B.39}$$

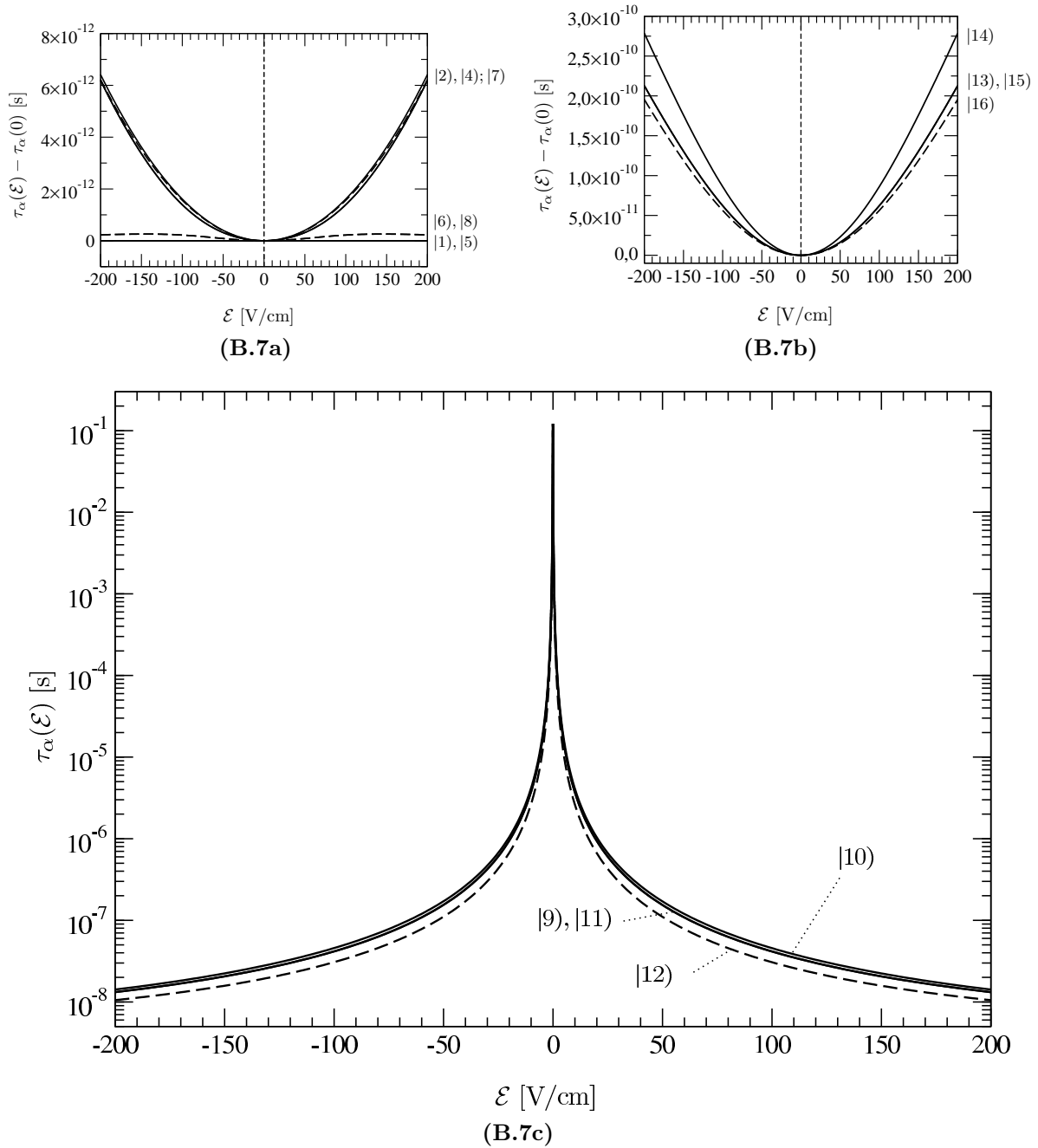
wobei die Angabe für  $\mathcal{B}_{\text{krit.}}(2P_{3/2})$  sehr vage ist, da der Übergang zwischen Zeeman- und Paschen-Back-Bereich für die einzelnen Zustände sehr unterschiedlich ist. Die Breit-Rabi-Diagramme B.4b und B.4c der  $2S_{1/2}$ - und  $2P_{1/2}$ -Zustände entsprechen dem Diagramm der  $1S_{1/2}$ -Zustände aus Abb. B.2. Das Diagramm der  $2P_{3/2}$ -Zustände dagegen zeigt einen deutlich komplexeren Verlauf der Energien dieser Zustände im Magnetfeld.

Nun kommen wir zur numerischen Berechnung der Verschiebung der atomaren Energieniveaus in einem äußeren konstanten und homogenen elektrischen Feld (Stark-Effekt). Als Grundlage hierfür dient die im letzten Abschnitt diskutierte Matrix des Dipoloperators, Tab. B.14. Da der Dipoloperator zu einer Mischung der  $2P$ - und  $2S$ -Zustände führt, erwarten wir eine Veränderung der Lebensdauern der Zustände, die ja im Zusammenhang mit den Imaginärteilen der komplexen Energieeigenwerte der Massenmatrix stehen.

Betrachten wir zunächst die Diagramme für die Abhängigkeit der Realteile der Eigenwerte vom elektrischen Feld  $\mathcal{E}$  in 3-Richtung, siehe Abb. B.6a-B.6c. Man sieht für (fast) alle



**Abbildung B.6:** Abhängigkeit der atomaren Energieniveaus (Realteile der Eigenwerte der Massenmatrix) vom elektrischen Feld  $\mathcal{E} = \mathbf{e}_3 \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}$ . Die zu den Diagrammen gehörenden Zustände sind die (B.6a)  $2P_{3/2^-}$ , (B.6b)  $2S_{1/2^-}$  und die (B.6c)  $2P_{1/2^-}$ -Zustände.



**Abbildung B.7:** Abhängigkeit der mittleren Lebensdauern ( $\tau_{S,P} = \Gamma_{S,P}^{-1}$ ) vom elektrischen Feld  $\mathcal{E} = e_3 \cdot \mathbf{E}$ . Die Diagramme B.7a und B.7b zeigen die relative Änderung der Lebensdauern der  $2P$ -Zustände, Diagramm B.7c zeigt in logarithmischer Auftragung die absolute mittlere Lebensdauer der  $2S$ -Zustände.

Zustände eine in guter Näherung quadratischen Verlauf der Energien für kleine ( $|\mathcal{E}| \lesssim 50 \text{ V}$ ) Felder, für größere Feldstärken tragen höhere, gerade Potenzen von  $\mathcal{E}$  bei. Beiträge von Zuständen mit anderen Hauptquantenzahlen sind hier vernachlässigt worden.

In Abb. B.7 sind die mittleren Lebensdauern (inverse Zerfallsraten) der einzelnen Zustände dargestellt. Während sich die Lebensdauern der  $2P$ -Zustände aufgrund des Einflusses der  $2S$ -Zustände relativ gering verlängern, fällt die Lebensdauer der  $2S$ -Zustände rapide ab.

Wir wollen dies ein wenig besser verstehen und betrachten dazu exemplarisch den atomaren Zustand  $|2\hat{S}_{1/2}, 1, 1\rangle$ . Wir vernachlässigen bei der folgenden Diskussion die P-verletzenden Beiträge zur Massenmatrix und die nichtdiagonalen Beiträge des Hyperfeinstruktur-Hamiltonoperators. Die inneren atomaren Zustände sind dann näherungsweise durch die Gesamtdrehimpulszustände gegeben.

In einem schwachen elektrischen Feld  $\mathcal{E}$  in 3-Richtung wird der feldfreie Zustand  $|2\hat{S}_{1/2}, 1, 1\rangle \approx |2S_{1/2}, 1, 1\rangle$  gestört und erhält z.B. einen Beitrag des Zustands  $|2\hat{P}_{1/2}, 1, 1\rangle \approx |2P_{1/2}, 1, 1\rangle$ , d.h. es gilt (siehe Tabelle B.14a, S. 204) nach störungstheoretischen Überlegungen

$$|2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}\rangle \approx |2\hat{S}_{1/2}, 1, 1\rangle + \frac{\sqrt{3}er_B\mathcal{E}}{\Delta E} |2\hat{P}_{1/2}, 1, 1\rangle, \quad (\text{B.40})$$

mit der komplexen Energiedifferenz

$$\Delta E \approx \mathcal{S} - \frac{i}{2}(\Gamma_S - \Gamma_P). \quad (\text{B.41})$$

Dabei ist  $\mathcal{S} = E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}}$  die Energie-Differenz der Schwerpunkte der  $2S_{1/2}$ - und  $2P_{1/2}$ -Zustände, also die Lamb-Shift. Die Hyperfeinaufspaltung wurde in der Energiedifferenz außer Acht gelassen, da wir hier nur grobe Abschätzungen vornehmen wollen. Desweiteren wurden in (B.40) alle Beiträge der  $2P_{3/2}$ -Zustände aufgrund der etwa zehn mal größeren Energiedifferenz vernachlässigt.

Der zu  $|2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}\rangle$  gehörende Energieeigenwert bekommt erst in zweiter Ordnung Störungstheorie einen Beitrag des elektrischen Felds, d.h. es gilt näherungsweise

$$\begin{aligned} E(2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}) &\approx E(2\hat{S}_{1/2}, 1, 1) + \frac{(\sqrt{3}er_B\mathcal{E})^2}{\Delta E} \\ &\approx \mathcal{S} - \frac{i}{2}\Gamma_S + \frac{(\sqrt{3}er_B\mathcal{E})^2}{|\Delta E|^2} \Delta E^*. \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

Setzt man  $\Delta E^*$  gemäß Gl. (B.41) hier ein, so erhält man

$$E(2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}) \approx \mathcal{S} \left[ 1 + \left( \frac{\sqrt{3}er_B\mathcal{E}}{|\Delta E|} \right)^2 \right] - \frac{i}{2}\Gamma_S \left[ 1 + \frac{\Gamma_P - \Gamma_S}{\Gamma_S} \left( \frac{\sqrt{3}er_B\mathcal{E}}{|\Delta E|} \right)^2 \right]. \quad (\text{B.43})$$



Wir sehen also, dass selbst bei einer sehr kleinen Verschiebung des Realteils der Energie, d.h. für

$$\left( \frac{\sqrt{3}er_B\mathcal{E}}{|\Delta E|} \right)^2 \ll 1 \quad (\text{B.44})$$

eine sehr große Änderung der Zerfallsrate

$$\Gamma(2\hat{S}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}) \approx \Gamma_S \left[ 1 + \frac{\Gamma_P - \Gamma_S}{\Gamma_S} \left( \frac{\sqrt{3}er_B\mathcal{E}}{|\Delta E|} \right)^2 \right] \quad (\text{B.45})$$

möglich ist, da für die freien Zerfallsraten  $\Gamma_{S,P}$  nach den Gln. (B.38), (B.37)  $\Gamma_P/\Gamma_S \approx 10^7$  und somit auch

$$\frac{\Gamma_P - \Gamma_S}{\Gamma_S} \approx 10^7 \quad (\text{B.46})$$

gilt. Selbst bei einem schwachen elektrischen Feld tritt also eine Vervielfachung der Zerfallsrate und eine damit verbundene, starke Verkürzung der Lebensdauer der metastabilen  $2S$ -Zustände auf.

Bei einer analogen Rechnung für den Zustand  $|2\hat{P}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E})$  würde man dagegen die Zerfallsrate

$$\Gamma(2\hat{P}_{1/2}, 1, 1, \mathcal{E}) \approx \Gamma_P \left[ 1 - \frac{\Gamma_P - \Gamma_S}{\Gamma_P} \left( \frac{\sqrt{3}er_B\mathcal{E}}{|\Delta E|} \right)^2 \right] \quad (\text{B.47})$$

erhalten. Hier tritt der positive Faktor

$$\frac{\Gamma_P - \Gamma_S}{\Gamma_P} \approx 1 \quad (\text{B.48})$$

auf, der in (B.47) mit einem negativen Vorzeichen behaftet ist. Eine kleine Änderung des Realteils der Energie ist hier also auch mit einer kleinen Änderung der Zerfallsrate verbunden. Das negative Vorzeichen erklärt die relative Verlängerung der Lebensdauer der  $2P$ -Zustände.

## B.3 Deuterium

### B.3.1 Die Massenmatrix im Unterraum mit Hauptquantenzahl $n = 2$

Deuterium hat einen Kernspin von  $I = 1$ . Somit treten im 24-dimensionalen ( $n = 2$ )-Unterraum Gesamtdrehimpulse im Bereich  $\frac{1}{2} \leq F \leq \frac{5}{2}$  auf. Mit der Formel (B.36) folgt für die Hyperfeinaufspaltung der ( $n = 2$ )-Zustände insgesamt

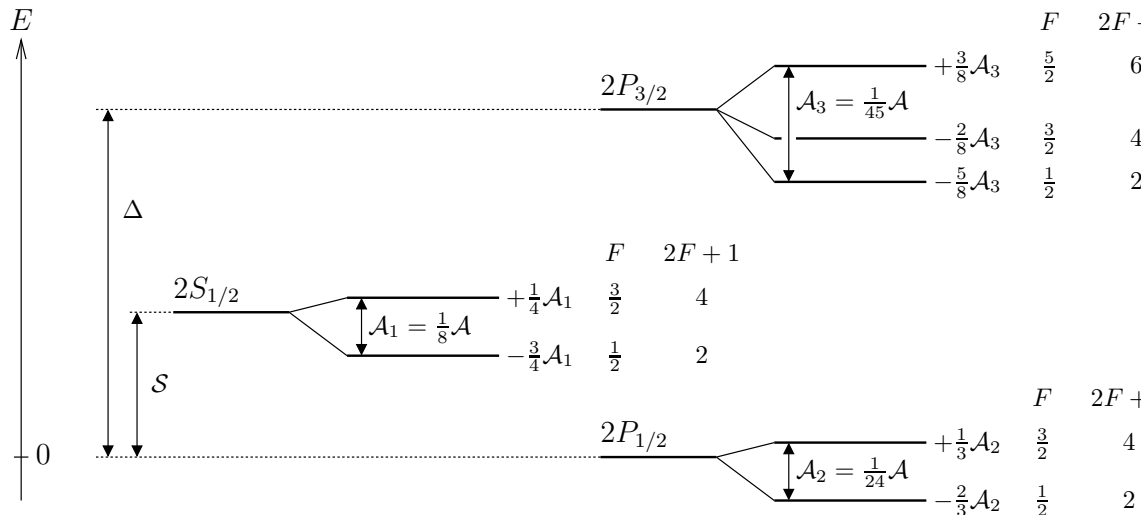
$nL_J$	$1S_{1/2}$ (aus [59])	$2S_{1/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$
$\mathcal{A}(I = 1, nL_J)$	$\mathcal{A} = 327.384 \text{ MHz } h$	$\frac{1}{8}\mathcal{A}$	$\frac{1}{24}\mathcal{A}$	$\frac{1}{45}\mathcal{A}$

**Tabelle B.16:** Skalierung der Hyperfeinaufspaltung für Deuterium mit  $n \leq 2$ .

Das Termschema der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium ist in Abb. B.8 dargestellt. Die experimentellen Werte (aus [57]) für die Lamb-Shift und die Feinstrukturaufspaltung betragen hier aber

$$\mathcal{S}/h = 1059.282(64) \text{ MHz}, \quad (\text{B.49})$$

$$\Delta/h = 10971.90(12) \text{ MHz}. \quad (\text{B.50})$$



**Abbildung B.8:** Termschema der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium (nicht maßstabsgetreu).

Für die Zerfallszeiten werden die gleichen Werte wie für Wasserstoff verwendet, siehe Gln.

(B.37), (B.38). Die Matrizen  $\underline{\mathcal{M}}_0$ ,  $\underline{\mu}/\mu_B$  und  $\underline{D}/(er_B)$  sind auf den folgenden Seiten in den Tabellen B.17 bis B.23 dargestellt.

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$\Delta + \frac{A}{120} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	0	$\Delta + \frac{A}{120} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	$\Delta - \frac{A}{180} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\sqrt{5}A}{576}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	$-\frac{\sqrt{5}A}{576}$	$\frac{A}{72} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i(\delta_1 + \delta_2)\mathcal{S}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$-i(\delta_1 + \delta_2)\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{A}{24} - \frac{i}{2}\Gamma_S$

(B.17a)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$\Delta + \frac{A}{120} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	$\Delta - \frac{A}{180} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\sqrt{5}A}{576}$	0	0	0	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}A}{576}$	$\frac{A}{72} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S} + i\delta_2\mathcal{S}$	0	0	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S} - i\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{A}{24} - \frac{i}{2}\Gamma_S$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	0	$\Delta - \frac{A}{72} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{A}{288\sqrt{2}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	0	$-\frac{A}{288\sqrt{2}}$	$-\frac{A}{36} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S} - 2i\delta_2\mathcal{S}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S} + 2i\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} - \frac{A}{12} - \frac{i}{2}\Gamma_S$

(B.17b)

**Tabelle B.17:** Die freie, nichtthermitesche Massenmatrix  $\underline{\mathcal{M}}_0$  für Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum ( $F_3 = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ ).

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{120}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$\Delta - \frac{\mathcal{A}}{180}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\sqrt{5}\mathcal{A}}{576}$	0	0	0	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}\mathcal{A}}{576}$	$\frac{\mathcal{A}}{72} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S}$ $+i\delta_2\mathcal{S}$	0	0	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S}$ $-i\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{\mathcal{A}}{24}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_S$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	0	$\Delta - \frac{\mathcal{A}}{72}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\mathcal{A}}{288\sqrt{2}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	0	$-\frac{\mathcal{A}}{288\sqrt{2}}$	$-\frac{\mathcal{A}}{36}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$i\delta_1\mathcal{S}$ $-2i\delta_2\mathcal{S}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	0	0	$-i\delta_1\mathcal{S}$ $+2i\delta_2\mathcal{S}$	$\mathcal{S} - \frac{\mathcal{A}}{12}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_S$

(B.17c)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{120} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	$\Delta - \frac{\mathcal{A}}{180}$ $-\frac{i}{2}\Gamma_P$	$-\frac{\sqrt{5}\mathcal{A}}{576}$	0	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}\mathcal{A}}{576}$	$\frac{\mathcal{A}}{72} - \frac{i}{2}\Gamma_P$	$i(\delta_1 + \delta_2)\mathcal{S}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	0	$-i(\delta_1 + \delta_2)\mathcal{S}$	$\mathcal{S} + \frac{\mathcal{A}}{24} - \frac{i}{2}\Gamma_S$	0
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$	0	0	0	0	$\Delta + \frac{\mathcal{A}}{120} - \frac{i}{2}\Gamma_P$

(B.17d)

**Tabelle B.17:** Die freie, nichthermitesche Massenmatrix  $\mathcal{M}_0$  für Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum ( $F_3 = -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}$ ).

$F'_3 \backslash F_3$	5/2	3/2	1/2	-1/2	-3/2	-5/2
5/2	0	B.18b	0	0	0	0
3/2	(B.18b) <sup>†</sup>	0	B.18c	0	0	0
1/2	0	(B.18c) <sup>†</sup>	0	B.18d	0	0
-1/2	0	0	(B.18d) <sup>†</sup>	0	B.18e	0
-3/2	0	0	0	(B.18e) <sup>†</sup>	0	B.18f
-5/2	0	0	0	0	(B.18f) <sup>†</sup>	0

**(B.18a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{\mu}_1$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$-\frac{g+2}{2\sqrt{5}}$	$\frac{g+2}{\sqrt{30}}$	$-\frac{g-1}{\sqrt{6}}$	0

(B.18b)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}(g+2)}{5}$	$\frac{g+2}{5\sqrt{2}}$	$-\frac{g-1}{\sqrt{10}}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$-\frac{g+2}{10\sqrt{3}}$	$-\frac{11(g+2)}{30\sqrt{3}}$	$-\frac{2(g-1)}{3\sqrt{15}}$	0	$\frac{\sqrt{5}(g+2)}{6\sqrt{3}}$	$-\frac{\sqrt{5}(g-1)}{3\sqrt{6}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{g-1}{2\sqrt{15}}$	$-\frac{2(g-1)}{3\sqrt{15}}$	$\frac{g-4}{6\sqrt{3}}$	0	$\frac{g-1}{6\sqrt{3}}$	$-\frac{g-4}{3\sqrt{6}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$-\frac{g}{2\sqrt{3}}$	0	0	$\frac{g}{\sqrt{6}}$

(B.18c)

**Tabelle B.18:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_1$  der ersten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{3(g+2)}{10}$	$\frac{g+2}{10}$	$-\frac{g-1}{2\sqrt{5}}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{g+2}{10}$	$-\frac{11(g+2)}{45}$	$-\frac{4(g-1)}{9\sqrt{5}}$	0	$\frac{(g+2)}{18}\sqrt{5}$	$-\frac{\sqrt{5}(g-1)}{9\sqrt{2}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{g-1}{2\sqrt{5}}$	$-\frac{4(g-1)}{9\sqrt{5}}$	$\frac{g-4}{9}$	0	$\frac{g-1}{18}$	$-\frac{g-4}{9\sqrt{2}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{g}{3}$	0	0	$\frac{g}{3\sqrt{2}}$
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}(g+2)}{18}$	$\frac{1-g}{18}$	0	$-\frac{5(g+2)}{18}$	$-\frac{2\sqrt{2}(g-1)}{9}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{5}(g-1)}{9\sqrt{2}}$	$\frac{g-4}{9\sqrt{2}}$	0	$-\frac{2\sqrt{2}(g-1)}{9}$	$\frac{4-g}{18}$	0
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{g}{3\sqrt{2}}$	0	0	$\frac{g}{6}$

(B.18d)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}(g+2)}{5}$	$\frac{g+2}{10\sqrt{3}}$	$-\frac{g-1}{2\sqrt{15}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$-\frac{g+2}{5\sqrt{2}}$	$-\frac{11(g+2)}{30\sqrt{3}}$	$-\frac{2(g-1)}{3\sqrt{15}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{g-1}{\sqrt{10}}$	$-\frac{2(g-1)}{3\sqrt{15}}$	$\frac{g-4}{6\sqrt{3}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{g}{2\sqrt{3}}$
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}(g+2)}{6\sqrt{3}}$	$-\frac{g-1}{6\sqrt{3}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{5}(g-1)}{3\sqrt{6}}$	$\frac{g-4}{3\sqrt{6}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{g}{\sqrt{6}}$

(B.18e)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$-\frac{g+2}{2\sqrt{5}}$
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$-\frac{g+2}{\sqrt{30}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{g-1}{\sqrt{6}}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0

(B.18f)

**Tabelle B.18:** (Fortsetzung) Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_1$  der ersten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum.

$F_3' \backslash F_3$	5/2	3/2	1/2	-1/2	-3/2	-5/2
5/2	0	B.19b	0	0	0	0
3/2	(B.19b) <sup>†</sup>	0	B.19c	0	0	0
1/2	0	(B.19c) <sup>†</sup>	0	B.19d	0	0
-1/2	0	0	(B.19d) <sup>†</sup>	0	B.19e	0
-3/2	0	0	0	(B.19e) <sup>†</sup>	0	B.19f
-5/2	0	0	0	0	(B.19f) <sup>†</sup>	0

**(B.19a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\mu_2$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$\frac{i(g+2)}{2\sqrt{5}}$	$-\frac{i(g+2)}{\sqrt{30}}$	$\frac{i(g-1)}{\sqrt{6}}$	0

(B.19b)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{i\sqrt{2}(g+2)}{5}$	$-\frac{i(g+2)}{5\sqrt{2}}$	$\frac{i(g-1)}{\sqrt{10}}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{i(g+2)}{10\sqrt{3}}$	$\frac{11i(g+2)}{30\sqrt{3}}$	$\frac{2i(g-1)}{3\sqrt{15}}$	0	$-\frac{i\sqrt{5}(g+2)}{6\sqrt{3}}$	$\frac{i\sqrt{5}(g-1)}{3\sqrt{6}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$-\frac{i(g-1)}{2\sqrt{15}}$	$\frac{2i(g-1)}{3\sqrt{15}}$	$-\frac{i(g-4)}{6\sqrt{3}}$	0	$-\frac{i(g-1)}{6\sqrt{3}}$	$\frac{i(g-4)}{3\sqrt{6}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$\frac{ig}{2\sqrt{3}}$	0	0	$-\frac{ig}{\sqrt{6}}$

(B.19c)

**Tabelle B.19:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\mu_2$  der zweiten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{3i(g+2)}{10}$	$-\frac{i(g+2)}{10}$	$\frac{i(g-1)}{2\sqrt{5}}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{i(g+2)}{10}$	$\frac{11i(g+2)}{45}$	$\frac{4i(g-1)}{9\sqrt{5}}$	0	$-\frac{i\sqrt{5}(g+2)}{18}$	$\frac{i\sqrt{5}(g-1)}{9\sqrt{2}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{i(g-1)}{2\sqrt{5}}$	$\frac{4i(g-1)}{9\sqrt{5}}$	$-\frac{i(g-4)}{9}$	0	$-\frac{i(g-1)}{18}$	$\frac{i(g-4)}{9\sqrt{2}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{ig}{3}$	0	0	$-\frac{ig}{3\sqrt{2}}$
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$\frac{i\sqrt{5}(g+2)}{18}$	$\frac{i(g-1)}{18}$	0	$\frac{5i(g+2)}{18}$	$\frac{2i\sqrt{2}(g-1)}{9}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$-\frac{i\sqrt{5}(g-1)}{9\sqrt{2}}$	$-\frac{i(g-4)}{9\sqrt{2}}$	0	$\frac{2i\sqrt{2}(g-1)}{9}$	$\frac{i(g-4)}{18}$	0
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{ig}{3\sqrt{2}}$	0	0	$-\frac{ig}{6}$

(B.19d)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{i\sqrt{2}(g+2)}{5}$	$-\frac{i(g+2)}{10\sqrt{3}}$	$\frac{i(g-1)}{2\sqrt{15}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{i(g+2)}{5\sqrt{2}}$	$\frac{11i(g+2)}{30\sqrt{3}}$	$\frac{2i(g-1)}{3\sqrt{15}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$-\frac{i(g-1)}{\sqrt{10}}$	$\frac{2i(g-1)}{3\sqrt{15}}$	$-\frac{i(g-4)}{6\sqrt{3}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{ig}{2\sqrt{3}}$
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$\frac{i\sqrt{5}(g+2)}{6\sqrt{3}}$	$\frac{i(g-1)}{6\sqrt{3}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$-\frac{i\sqrt{5}(g-1)}{3\sqrt{6}}$	$-\frac{i(g-4)}{3\sqrt{6}}$	0
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{ig}{\sqrt{6}}$

(B.19e)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{i(g+2)}{2\sqrt{5}}$
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{i(g+2)}{\sqrt{30}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$-\frac{i(g-1)}{\sqrt{6}}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0

(B.19f)

**Tabelle B.19:** (Fortsetzung) Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_2$  der zweiten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im ( $n = 2$ )-Unterraum.



	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$-\frac{2+g}{2}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	0	$-\frac{3(2+g)}{10}$	$-\frac{\sqrt{2}(2+g)}{5\sqrt{3}}$	$-\frac{\sqrt{2}(1-g)}{\sqrt{15}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{2}(2+g)}{5\sqrt{3}}$	$-\frac{11(2+g)}{30}$	$\frac{2(1-g)}{3\sqrt{5}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{2}(1-g)}{\sqrt{15}}$	$\frac{2(1-g)}{3\sqrt{5}}$	$-\frac{4-g}{6}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	0	$-\frac{g}{2}$

(B.20a)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{2+g}{10}$	$-\frac{2+g}{5}$	$-\frac{1-g}{\sqrt{5}}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{2+g}{5}$	$-\frac{11(2+g)}{90}$	$\frac{2(1-g)}{9\sqrt{5}}$	0	$-\frac{\sqrt{5}(2+g)}{9}$	$-\frac{\sqrt{10}(1-g)}{9}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{1-g}{\sqrt{5}}$	$\frac{2(1-g)}{9\sqrt{5}}$	$-\frac{4-g}{18}$	0	$\frac{1-g}{9}$	$-\frac{\sqrt{2}(4-g)}{9}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{g}{6}$	0	0	$-\frac{\sqrt{2}g}{3}$
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}(2+g)}{9}$	$\frac{1-g}{9}$	0	$-\frac{5(2+g)}{18}$	$\frac{2\sqrt{2}(1-g)}{9}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{10}(1-g)}{9}$	$-\frac{\sqrt{2}(4-g)}{9}$	0	$\frac{2\sqrt{2}(1-g)}{9}$	$\frac{4-g}{18}$	0
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{\sqrt{2}g}{3}$	0	0	$\frac{g}{6}$

(B.20b)

**Tabelle B.20:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\underline{\mu}_3$  der dritten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum  $(F_3 = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ .

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{2+g}{10}$	$-\frac{2+g}{5}$	$-\frac{1-g}{\sqrt{5}}$	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$-\frac{2+g}{5}$	$\frac{11(2+g)}{90}$	$-\frac{2(1-g)}{9\sqrt{5}}$	0	$-\frac{\sqrt{5}(2+g)}{9}$	$-\frac{\sqrt{10}(1-g)}{9}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$-\frac{1-g}{\sqrt{5}}$	$-\frac{2(1-g)}{9\sqrt{5}}$	$\frac{4-g}{18}$	0	$\frac{1-g}{9}$	$-\frac{\sqrt{2}(4-g)}{9}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{g}{6}$	0	0	$-\frac{\sqrt{2}g}{3}$
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{5}(2+g)}{9}$	$\frac{1-g}{9}$	0	$\frac{5(2+g)}{18}$	$-\frac{2\sqrt{2}(1-g)}{9}$	0
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{10}(1-g)}{9}$	$-\frac{\sqrt{2}(4-g)}{9}$	0	$-\frac{2\sqrt{2}(1-g)}{9}$	$-\frac{4-g}{18}$	0
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{\sqrt{2}g}{3}$	0	0	$-\frac{g}{6}$

(B.20c)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{3(2+g)}{10}$	$-\frac{\sqrt{2}(2+g)}{5\sqrt{3}}$	$-\frac{\sqrt{2}(1-g)}{\sqrt{15}}$	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$-\frac{\sqrt{\frac{2}{3}}(2+g)}{5}$	$\frac{11(2+g)}{30}$	$-\frac{2(1-g)}{3\sqrt{5}}$	0	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}(1-g)}{\sqrt{15}}$	$-\frac{2(1-g)}{3\sqrt{5}}$	$\frac{4-g}{6}$	0	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	0	0	$\frac{g}{2}$	0
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$	0	0	0	0	$\frac{2+g}{2}$

(B.20d)

**Tabelle B.20:** Die auf  $\mu_B$  normierte Matrix  $\mu_3$  der dritten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum  $(F_3 = -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2})$ .

$F'_3 \setminus F_3$	5/2	3/2	1/2	-1/2	-3/2	-5/2
5/2	0	B.21b	0	0	0	0
3/2	(B.21b) <sup>†</sup>	0	B.21c	0	0	0
1/2	0	(B.21c) <sup>†</sup>	0	B.21d	0	0
-1/2	0	0	(B.21d) <sup>†</sup>	0	B.21e	0
-3/2	0	0	0	(B.21e) <sup>†</sup>	0	B.21f
-5/2	0	0	0	0	(B.21f) <sup>†</sup>	0

**(B.21a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{D}_1$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	0	0	0	$-\frac{3}{\sqrt{2}}$

**(B.21b)**

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$-3\sqrt{\frac{3}{10}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$-\frac{2}{\sqrt{5}}$	0	0	$-\sqrt{\frac{5}{2}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	-1	0	0	$\sqrt{2}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	$-\frac{2}{\sqrt{5}}$	-1	0	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{2}$	0

**(B.21c)**

**Tabelle B.21:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_1$  der ersten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{3\sqrt{\frac{3}{5}}}{2}$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{4}{\sqrt{15}}$	0	0	$-\sqrt{\frac{5}{6}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{2}{\sqrt{3}}$	0	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{3\sqrt{\frac{3}{5}}}{2}$	$-\frac{4}{\sqrt{15}}$	$-\frac{2}{\sqrt{3}}$	0	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	0	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{5}{6}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0

(B.21d)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{3}{2\sqrt{5}}$
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{2}{\sqrt{5}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	-1
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$3\sqrt{\frac{3}{10}}$	$-\frac{2}{\sqrt{5}}$	-1	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{1}{2}$
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\sqrt{2}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{5}{2}}$	$-\sqrt{2}$	0

(B.21e)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{3}{\sqrt{2}}$

(B.21f)

**Tabelle B.21:** (Fortsetzung) Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_1$  der ersten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum.

$F'_3 \setminus F_3$	5/2	3/2	1/2	-1/2	-3/2	-5/2
5/2	0	B.22b	0	0	0	0
3/2	(B.22b) <sup>†</sup>	0	B.22c	0	0	0
1/2	0	(B.22c) <sup>†</sup>	0	B.22d	0	0
-1/2	0	0	(B.22d) <sup>†</sup>	0	B.22e	0
-3/2	0	0	0	(B.22e) <sup>†</sup>	0	B.22f
-5/2	0	0	0	0	(B.22f) <sup>†</sup>	0

**(B.22a)** Die Zuordnung der Tabellennummern zu den einzelnen Blöcken der Matrix  $\underline{D}_2$ . Es werden nur die Blöcke der oberen Hälfte der Matrix angegeben. Die unteren Blöcke folgen durch hermitesche Konjugation.

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	0	0	0	$\frac{3i}{\sqrt{2}}$

(B.22b)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$3i\sqrt{\frac{3}{10}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	$\frac{2i}{\sqrt{5}}$	0	0	$i\sqrt{\frac{5}{2}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	i	0	0	$-i\sqrt{2}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$-\frac{3i}{2\sqrt{5}}$	$\frac{2i}{\sqrt{5}}$	i	0	$-\frac{i}{2}$	$-i\sqrt{2}$	0

(B.22c)

**Tabelle B.22:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_2$  der zweiten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im ( $n = 2$ )-Unterraum. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{3}{2}i\sqrt{\frac{3}{5}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{4i}{\sqrt{15}}$	0	0	$i\sqrt{\frac{5}{6}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{2i}{\sqrt{3}}$	0	0	$-i\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}i\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{4i}{\sqrt{15}}$	$\frac{2i}{\sqrt{3}}$	0	$-\frac{i}{2\sqrt{3}}$	$-i\sqrt{\frac{2}{3}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{i}{2\sqrt{3}}$	0	0	$2i\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$i\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	0	$-\frac{i}{\sqrt{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$-i\sqrt{\frac{5}{6}}$	$i\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$2i\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{i}{\sqrt{3}}$	0

(B.22d)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{3i}{2\sqrt{5}}$
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{2i}{\sqrt{5}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	i
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$-3i\sqrt{\frac{3}{10}}$	$\frac{2i}{\sqrt{5}}$	i	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{i}{2}$
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$i\sqrt{2}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$-i\sqrt{\frac{5}{2}}$	$i\sqrt{2}$	0

(B.22e)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$-\frac{3i}{\sqrt{2}}$

(B.22f)

**Tabelle B.22:** (Fortsetzung) Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_2$  der zweiten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum.

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	0	0	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	0	$3\sqrt{\frac{2}{5}}$
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	0	$-2\sqrt{\frac{3}{5}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	0	0	0	$-\sqrt{3}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	0	$3\sqrt{\frac{2}{5}}$	$-2\sqrt{\frac{3}{5}}$	$-\sqrt{3}$	0

(B.23a)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$3\sqrt{\frac{3}{5}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{2}{\sqrt{15}}$	0	0	$\sqrt{\frac{10}{3}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$3\sqrt{\frac{3}{5}}$	$-\frac{2}{\sqrt{15}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	0	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{10}{3}}$	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0

(B.23b)

**Tabelle B.23:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_3$  der dritten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum ( $F_3 = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ ).

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$3\sqrt{\frac{3}{5}}$	0	0	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{2}{\sqrt{15}}$	0	0	$\sqrt{\frac{10}{3}}$
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$3\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{2}{\sqrt{15}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	$2\sqrt{\frac{2}{3}}$
$2P_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	0	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$
$2S_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{10}{3}}$	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$2\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0

(B.23c)

	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2S_{1/2}$ $\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$2P_{3/2}$ $\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}$	0	0	0	$3\sqrt{\frac{2}{5}}$	0
$2P_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	0	0	$2\sqrt{\frac{3}{5}}$	0
$2P_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	0	0	$\sqrt{3}$	0
$2S_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$3\sqrt{\frac{2}{5}}$	$2\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\sqrt{3}$	0	0
$2P_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{5}{2}$	0	0	0	0	0

(B.23d)

**Tabelle B.23:** Die auf  $er_B$  normierte Matrix  $\underline{D}_3$  der dritten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im  $(n=2)$ -Unterraum  $(F_3 = -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2})$ .



### B.3.2 Numerische Berechnung der Eigenwerte in elektrischen und magnetischen Feldern

In den nun folgenden Diagrammen, wie auch in der gesamten vorliegenden Arbeit wollen wir die in Tabelle B.24 dargestellte Nummerierung der Deuterium-Zustände vereinbaren. Auch hier betrachten wir exemplarisch in 3-Richtung orientierte Felder  $\mathcal{E} = \mathcal{E} \cdot \mathbf{e}_3$ ,  $\mathcal{B} = \mathcal{B} \cdot \mathbf{e}_3$ . Bei allgemeinen Feldern ist wie gehabt in der Notation aus Tab. B.24  $(\mathcal{E}, \mathcal{B}) \rightarrow (\mathcal{E}, \mathcal{B})$  zu ersetzen.

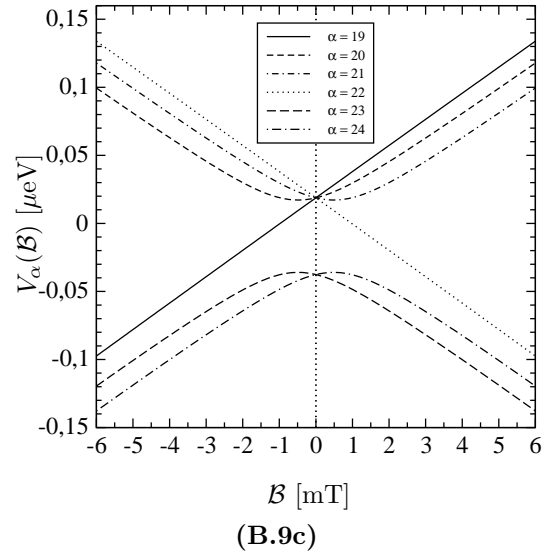
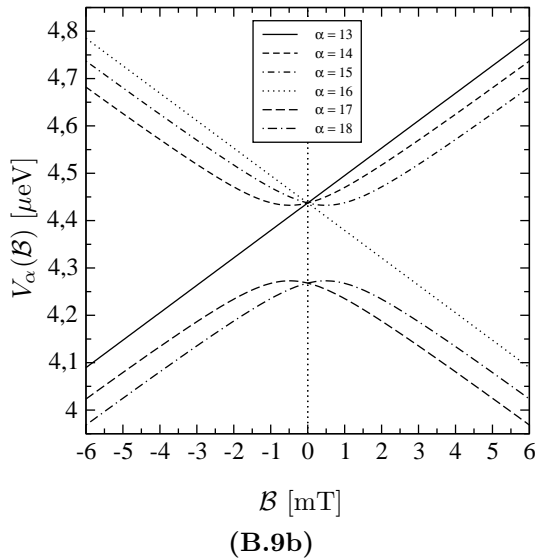
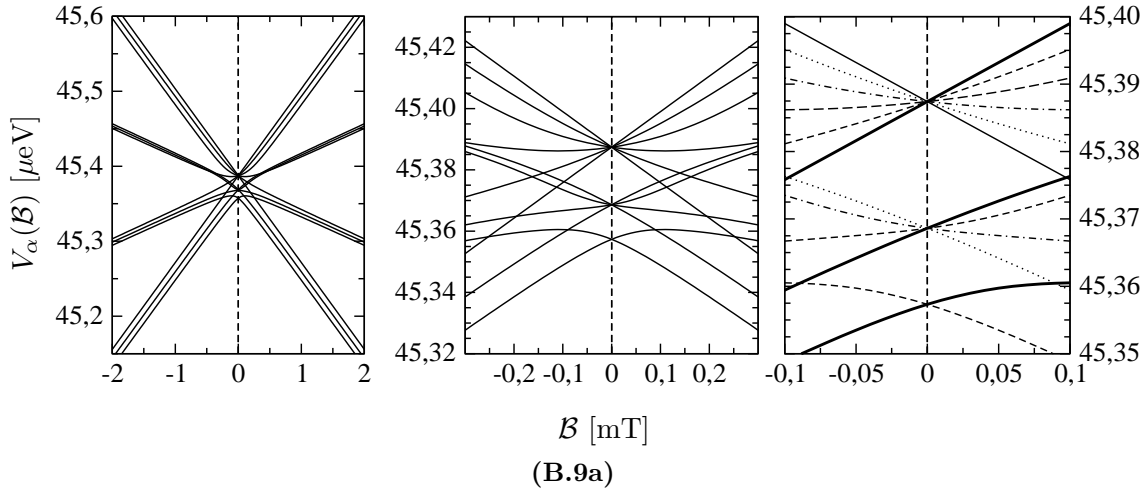
Die Reihenfolge der Durchnummerierung orientiert sich an der Reihenfolge beim Wasserstoff (d.h. innerhalb der Multipletts absteigend nach  $F_3$ ). Wie man in Abb. B.9b jedoch erkennt, entspricht dies nicht mehr der absteigenden Reihenfolge der Energieniveaus für kleines, in positive 3-Richtung orientiertes Magnetfeld.

$\alpha$	$ 2\hat{L}_J, F, F_3, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	$\alpha$	$ 2\hat{L}_J, F, F_3, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
1	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	13	$ 2\hat{S}_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
2	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	14	$ 2\hat{S}_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
3	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	15	$ 2\hat{S}_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
4	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	16	$ 2\hat{S}_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
5	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	17	$ 2\hat{S}_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
6	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{5}{2}, -\frac{5}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	18	$ 2\hat{S}_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
7	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	19	$ 2\hat{P}_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
8	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	20	$ 2\hat{P}_{1/2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
9	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	21	$ 2\hat{P}_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
10	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	22	$ 2\hat{P}_{1/2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
11	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	23	$ 2\hat{P}_{1/2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$
12	$ 2\hat{P}_{3/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$	24	$ 2\hat{P}_{1/2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \mathcal{E}, \mathcal{B})$

**Tabelle B.24:** Zuordnung der verschiedenen Notationen für Deuterium im  $(n = 2)$ -Unterraum. Die Reihenfolge der Zustände wurde absteigend nach den ungestörten Energien und innerhalb eines Multipletts absteigend nach  $F$  und  $F_3$  gewählt.

Die Breit-Rabi-Diagramme der  $(n = 2)$ -Zustände von Deuterium können Abb. B.9 entnommen werden. Dabei zeigt B.9a einen Überblick über das Verhalten der  $2P_{3/2}$ -Energieniveaus im Magnetfeld (wir haben uns eine Zuordnung der Zustände zu den einzelnen Linien erspart, um die Übersichtlichkeit der Diagramme nicht noch weiter zu

verringern). Anders ist dies bei den Diagrammen B.9b und B.9c, die das Verhalten der  $2S_{1/2}$ - und  $2P_{3/2}$ -Energieniveaus wiedergeben. Beide Diagramme gleichen sich optisch und in der Reihenfolge der Zustände. Man sieht hier, dass im Gegensatz zu den Breit-Rabi-Diagrammen von Wasserstoff (siehe Abb. B.4) die Reihenfolge der Nummerierung nicht mehr der absteigenden Reihenfolge der Energieniveaus für kleines magnetisches Feld entspricht. Weiterhin erkennt man hier - wie auch beim Wasserstoff - die Symmetrie der Diagramme bzgl. des Übergangs  $\mathcal{B} \rightarrow -\mathcal{B}$ ,  $F_3 \rightarrow -F_3$ .



**Abbildung B.9:** Breit-Rabi-Diagramme der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium. Abb. B.9a zeigt einen Überblick über die Verschiebung der Energieniveaus der  $2P_{3/2}$ -Zustände im magnetischen Feld. Die Abb. B.9b und B.9c zeigen die  $2S_{1/2}$ - und  $2P_{1/2}$ -Zustände. Zur Nummerierung siehe Tabelle B.24.

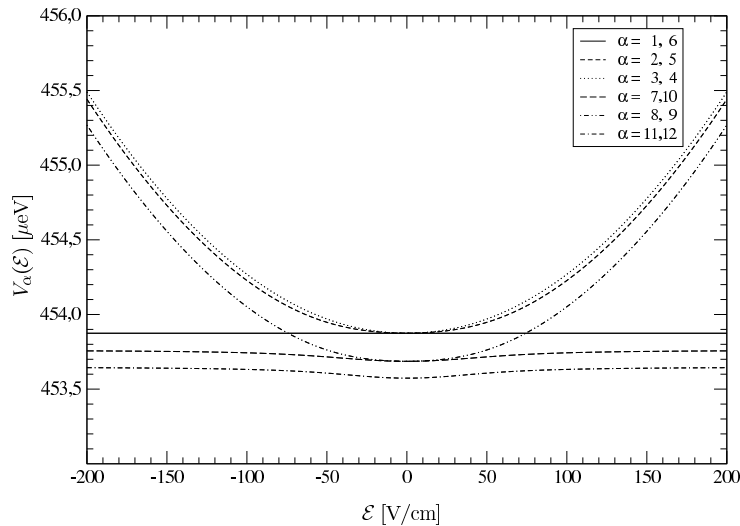
Die Verschiebung der Energieniveaus der einzelnen Zustände bei Anlegen eines elektri-

schen Felds in 3-Richtung von Deuterium ähnelt dem Verhalten der Wasserstoff-Zustände und kann Abb. B.10 entnommen werden.

Auch die Abhängigkeit der Lebensdauern  $\tau_\alpha(\mathcal{E}) = \Gamma_\alpha^{-1}(\mathcal{E})$  vom elektrischen Feld, dargestellt in Abb. B.11, ist ähnlich wie beim Wasserstoff, siehe Abb. B.7. Der Anstieg der Lebensdauern der  $2P$ -Zustände um bis zu  $10^{-10}$  s entspricht von der Größenordnung her auch den Ergebnissen für Wasserstoff. Es wurde in Abb. B.11a wieder auf eine Zuordnung der Linien zu den einzelnen  $2P$ -Zuständen verzichtet.

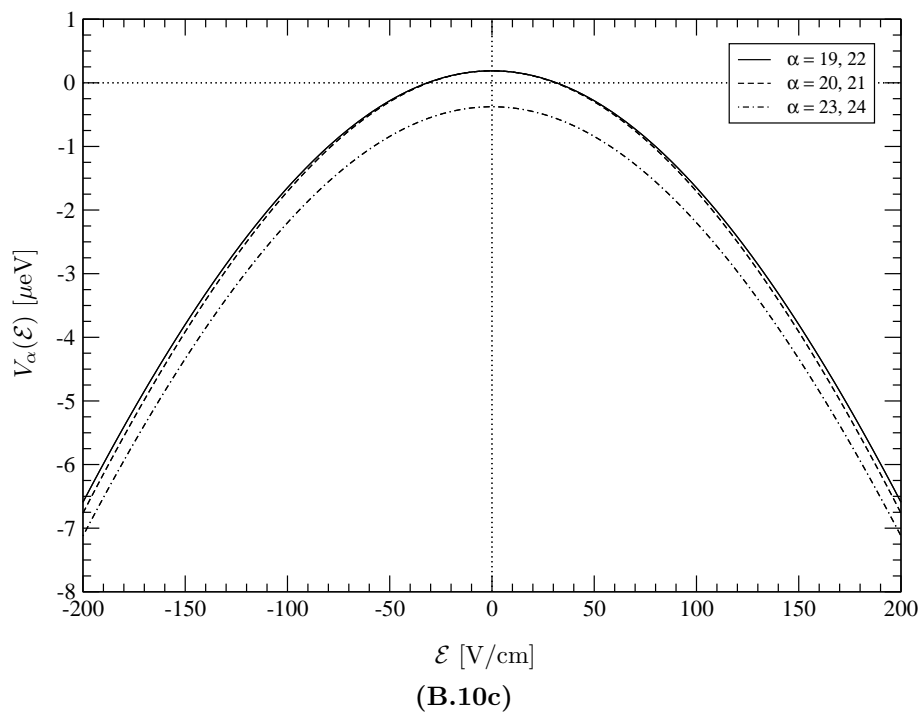
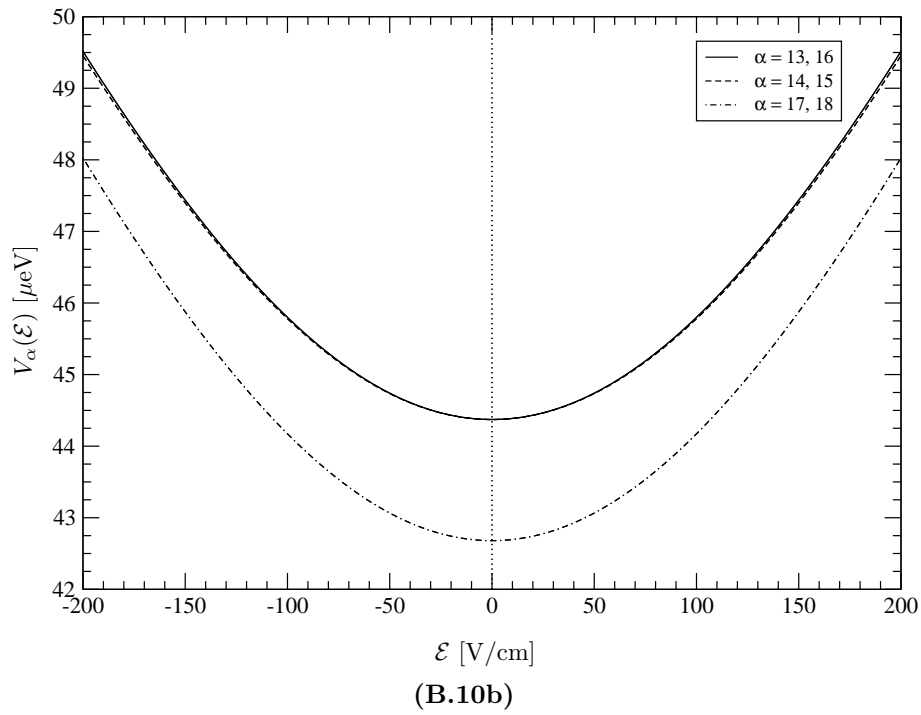
Diagramm B.11b zeigt in logarithmischer Auftragung (links) die Feld-Abhängigkeit der Lebensdauern der  $2S_{1/2}$ -Zustände. Es zeigt sich kein wesentlicher Unterschied zum Wasserstoff, siehe Abb. B.7c. Weiterhin sind in Abb. B.11b (Mitte und rechts) vergrößerte Ausschnitte der Lebensdauer-Abhängigkeit der  $2S$ -Zustände gezeigt.

Abschließend können wir feststellen, dass zwar die Breit-Rabi-Diagramme für Deuterium wesentlich komplexer als die des Wasserstoffs sind, die Abhängigkeit der Eigenwerte vom elektrischen Feld aber keine großen Unterschiede zeigt.

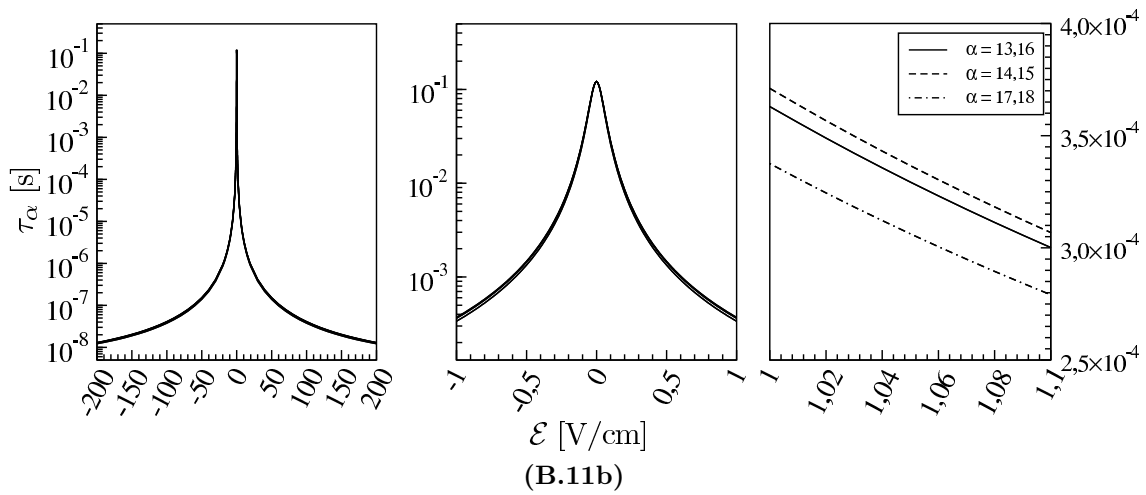
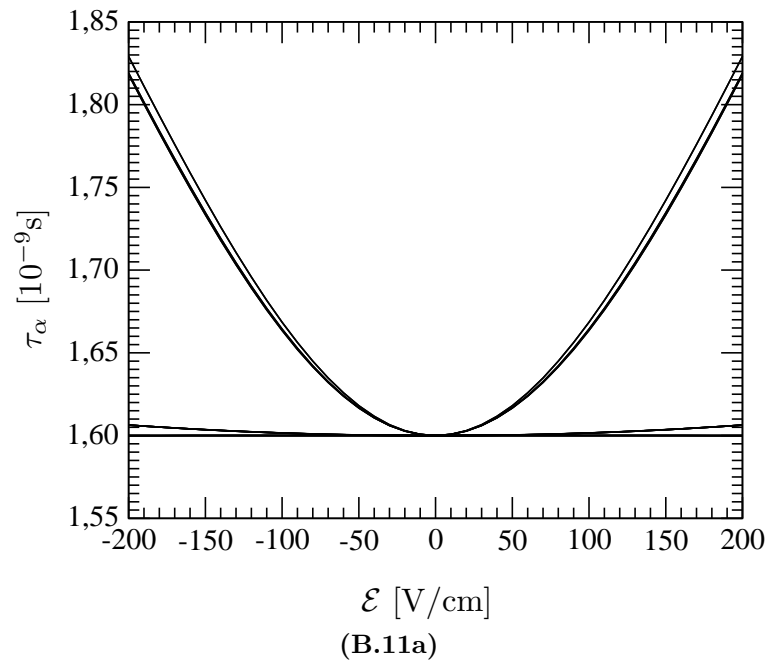


(B.10a)

**Abbildung B.10:** Energieeigenwerte (Realteile) der  $2P_{3/2}$ -Zustände von Deuterium im elektrischen Feld  $\mathcal{E} = e_3 \cdot \mathcal{E}$ . Zur Nummerierung siehe Tabelle B.24.



**Abbildung B.10:** Energieniveaus der  $2S_{1/2}$ - (B.10b) und  $2P_{1/2}$ -Zustände (B.10c) von Deuterium im elektrischen Feld  $\mathcal{E} = e_3 \cdot \mathcal{E}$ . Zur Nummerierung siehe Tabelle B.24.



**Abbildung B.11:** Lebensdauern der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium im elektrischen Feld  $\mathcal{E} = e_3 \cdot \mathbf{E}$ . Diagramm B.11a zeigt die Abhängigkeit der  $2P$ -Zustände, B.11b die  $2S_{1/2}$ -Zustände. Zur Nummerierung siehe Tabelle B.24.



# Anhang C

---

## Die Gabor Transformation

---

Die Fourier Transformation zerlegt eine quadratintegrale Funktion  $\psi(x)$  in ebene Wellen  $e^{ikx}$ . Die Amplituden-Funktion  $\tilde{\psi}(k)$ , die als Fourier-Transformierte bezeichnet wird, lautet

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{2\pi} \int dx \, \psi(x) e^{-ikx} , \quad (\text{C.1})$$

während die inverse Fourier-Transformation gegeben ist durch

$$\psi(x) = \int dk \, \tilde{\psi}(k) e^{ikx} . \quad (\text{C.2})$$

Die Fourier Transformation ist nicht in der Lage, eine Phasenraum-Beschreibung der Funktion  $\psi(x)$  zu geben, da die Basis-Funktionen zwar einen scharfen Impuls  $k$ , jedoch - als ebene Wellen - keine Lokalisierung im Ortsraum haben. In praktischen Fällen ist man oft am Frequenzspektrum eines Signals zu einer bestimmten Zeit interessiert, bzw. am Impulsspektrum einer Funktion an einem bestimmten Ort. Zu diesem Zweck wurde 1946 von Gabor [41] die nach ihm benannte Transformation eingeführt, die auch als *gefensterte* Fourier Transformation (Windowed Fourier Transform) oder *Short Time Fourier Transform* (STFT) bekannt ist.

Die Gabor Transformation führt eine um Null zentrierte Fensterfunktion  $g(x)$  ein, für die gilt

$$g(x) \begin{cases} \neq 0 & |x| \lesssim L/2 \\ = 0 & |x| \gtrsim L/2 \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

d.h.  $g(x)$  hat etwa die Breite  $L$ . Die Gabor Transformation schneidet nun also einen um ein  $x_0$  lokalisierten Teil der Funktion  $\psi(x)$  durch Multiplikation mit der (komplex konjugierten<sup>1</sup>) Fensterfunktion  $g^*(x - x_0)$  aus und berechnet die (inverse) Fourier Transformation

---

<sup>1</sup>aus Konventionsgründen

(siehe Abb. C.1):

$$\hat{\psi}(k, x_0) := \int dx \, \psi(x) g^*(x - x_0) e^{-ikx} . \quad (\text{C.4})$$

Dies definiert die Gabor-Transformierte, die nun eine Beschreibung der Funktion  $\psi(x)$  um den Phasenraumpunkt  $(k, x_0)$  liefert. Hat das Fenster etwa die Breite  $L$  im Ortsraum, so hat die Gabor-Transformierte aufgrund der Unschärferelation im Impulsraums etwa eine Breite  $1/L$ .

Die Umkehrtransformation zu (C.4), mit der man die ursprüngliche Funktion aus der Gabor-Transformierten rekonstruieren kann, lässt sich leicht berechnen. Hierzu kehrt man die inverse Fourier Transformation in (C.4) zunächst um und erhält

$$g^*(x - x_0) \psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk \, \hat{\psi}(k, x_0) e^{ikx} . \quad (\text{C.5})$$

Da die Fenster-Funktion Null werden kann, können wir sie an dieser Stelle nicht dividieren. Stattdessen multiplizieren wir mit  $g(x - x_0)$  und integrieren über  $x_0$ :

$$\left( \int dx_0 \, |g(x - x_0)|^2 \right) \psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx_0 \, \hat{\psi}(k, x_0) g(x - x_0) e^{ikx} . \quad (\text{C.6})$$

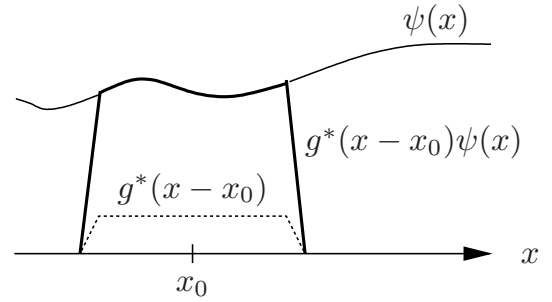
Falls nun  $g(x)$  quadratintegrabel ist und

$$0 < C_g := \int dx \, |g(x)|^2 < \infty \quad (\text{C.7})$$

erfüllt ist, können wir durch  $C_g$  dividieren und erhalten die Rekursionsformel

$$\psi(x) = \frac{1}{C_g 2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \, \hat{\psi}(k, x_0) g(x - x_0) e^{ikx} . \quad (\text{C.8})$$

Eine weitere nützliche Betrachtungsweise der Gabor Transformation (C.4) ist die eines Skalarprodukts im Raum der quadratintegrablen Funktionen  $L^2(\mathbb{R})$ , die von einer Variable



**Abbildung C.1:** Veranschaulichung der Gabor Transformation



abhängen. Dabei kann man die Funktionen

$$g_{k,x_0}(x) := g(x - x_0)e^{ikx} \quad (\text{C.9})$$

als neue Basisfunktionen des  $L^2(\mathbb{R})$  betrachten. Gl. (C.4) lautet dann

$$\hat{\psi}(k, x_0) = \langle g_{k,x_0}, \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R})} . \quad (\text{C.10})$$

Wir wollen nun einige Eigenschaften der Gabor Transformation auflisten, ohne diese näher zu begründen. Hierzu sei auf die Literatur [42, 60] verwiesen.

- (i) Die Basisfunktionen  $g_{k,x_0}(x)$  werden oft auch als *Noten* bezeichnet, da sie eine Länge (die Breite des Fensters) und eine Frequenz (bzw. Wellenzahl) haben.
- (ii) Das Auflösungsvermögen der einzelnen Basisfunktionen unterliegt einigen Beschränkungen aufgrund der festen Breite der  $g_{k,x_0}(x)$ . im Ortsraum, für große  $k$  liegt eine schlechte Ortsauflösung vor, d.h. die Basisfunktion  $g_{k,x_0}(x)$  ist dann *unterlokalisiert* im Ort. Für kleine  $k$  eine schlechte Skalenauflösung, d.h. die Basisfunktion  $g_{k,x_0}(x)$  ist dann *überlokalisiert* im Ort (siehe [60]).
- (iii) Die Basisfunktionen  $\{g_{k,x_0}(x); k, x_0 \in \mathbb{R}\}$  sind *übervollständig*, da sie nicht orthogonal sind, d.h. es gilt zwar

$$\int dk \int dx_0 g_{k,x_0}^*(x) g_{k,x_0}(x') = \frac{C_g}{2\pi} \delta(x - x') , \quad (\text{C.11})$$

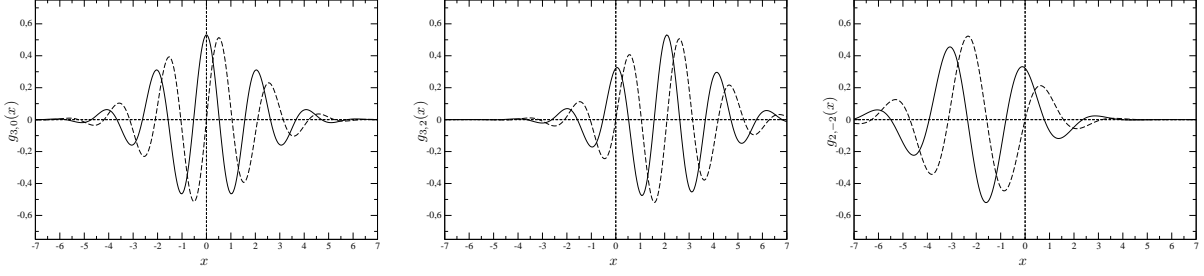
aber auch im Allgemeinen

$$\int dx g_{k',x'_0}(x) g_{k,x_0}(x) \neq C \delta(k - k') \delta(x - x') . \quad (\text{C.12})$$

- (iv) Es gilt das Analogon zur Parsevalschen Identität  $\langle f, g \rangle = \langle \tilde{f}, \tilde{g} \rangle$  der Fourier Transformation:

$$\int dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) = \int dk \int dx_0 \hat{\psi}_1^*(k, x_0) \hat{\psi}_2(k, x_0) \quad (\text{C.13})$$

- (v) Hieraus folgt: Ist  $\psi(x)$  quadratintegabel, dann ist auch  $\hat{\psi}(k, x_0)$  quadratintegabel im Phasenraum.
- (vi) Nicht jede im Phasenraum quadratintegable Funktion ist auch eine Gabor-Transformierte, da eine Gabor-Transformierte die Unschärferelation respektieren müssen.



**Abbildung C.2:** Drei repräsentative „Noten“  $g_{k,x_0}(x)$ . Von links nach rechts:  $g_{3,0}(x)$ ,  $g_{3,2}(x)$  und  $g_{2,-2}(x)$ . Der Realteil ist durchgezogen, der Imaginärteil gestrichelt dargestellt.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Idee der Gabor Transformation, eine Funktion im Phasenraum lokalisiert darzustellen, durch die Einführung von *Wavelets* (*Wellchen*) weiterentwickelt wurde. Es existieren hierzu u.a. in der Mathematik, Physik und Informatik unzählbare Anwendungen. Für weitere Information sei auf [42] und darin aufgeführte Referenzen verwiesen.

Wir wollen dieses Kapitel mit einem Beispiel abschließen. Betrachten wir eine um Null zentrierte Gauß-Funktion der Breite  $\sigma$ ,

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (\text{C.14})$$

und wählen weiter ein Gauß-Fenster der Breite  $\sigma_g$ , so dass

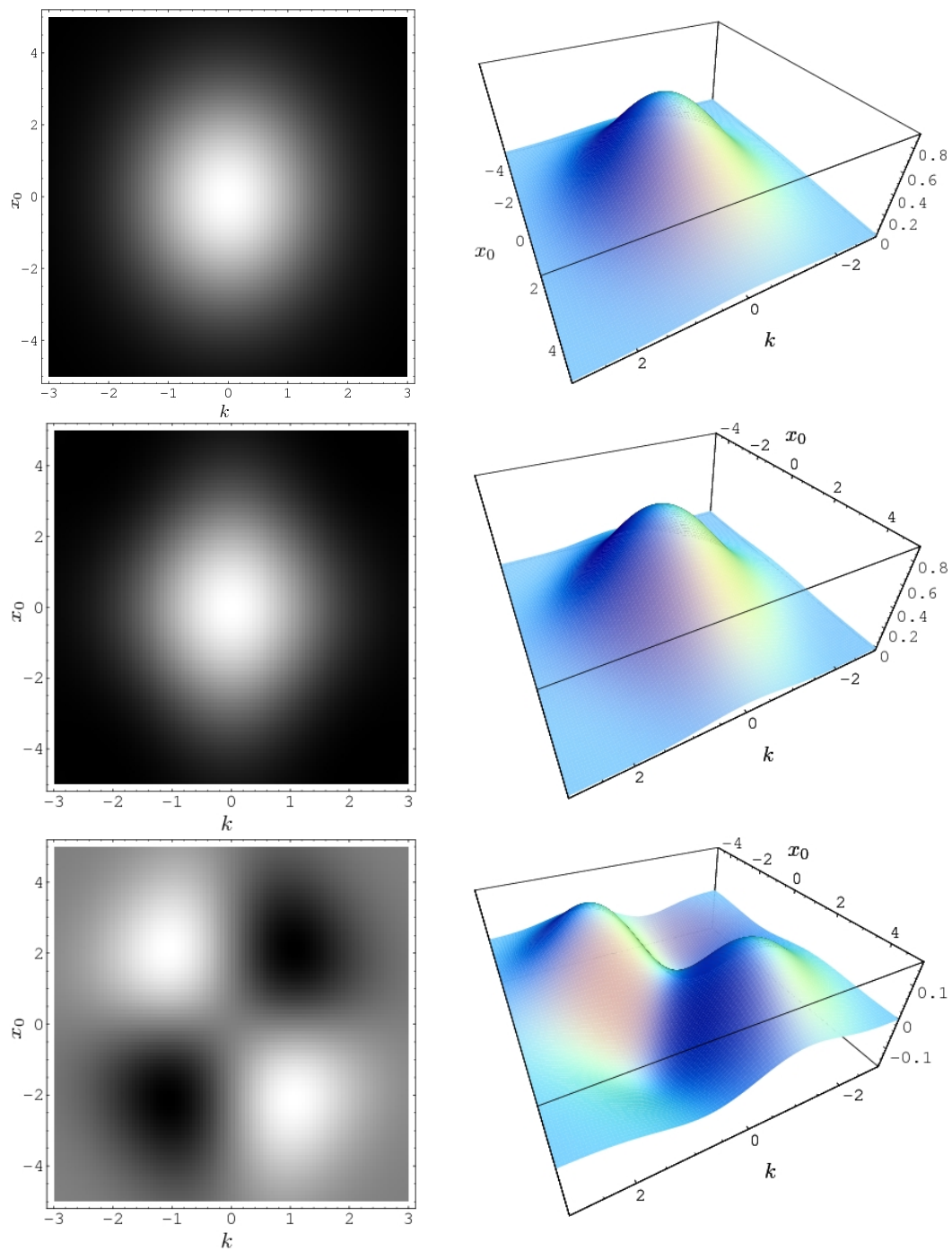
$$g_{k,x_0}(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma_g\sqrt{\pi}}} \exp \left\{ -\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_g^2} + ikx \right\}, \quad (\text{C.15})$$

dann lautet die Gabor-Transformierte

$$\hat{\varphi}(k, x_0) = \sqrt{\frac{2\sigma_g\sigma}{\sigma^2 + \sigma_g^2}} \exp \left\{ -\frac{x_0^2 + 2ikx_0\sigma^2 + k^2\sigma_g^2\sigma^2}{2(\sigma_g^2 + \sigma^2)} \right\}. \quad (\text{C.16})$$

Der Plot der Gabor-Transformierten ist in Abb. C.3 für  $\sigma = 1$  und  $\sigma_g = 2$  dargestellt, drei Beispiele für Basisfunktionen  $g_{k,x_0}(x)$  finden sich in Abb. C.2. Wählt man andere Konfigurationen von  $\sigma$  und  $\sigma_g$ , so kann man eine sehr breite Verteilung in  $x_0$  oder  $k$  erreichen. Wir wollen nur einige Spezialfälle betrachten:

- Eine breite Verteilung in  $x_0$  erhält man, wenn man  $(\sigma^2 + \sigma_g^2)$  sehr groß wählt, so dass die Exponentialfunktion für  $k = 0$  und  $x_0 \rightarrow \infty$  gegen Null geht. Wählt man  $(\sigma^2 + \sigma_g^2)$  dagegen sehr klein, so ist die Verteilung in  $x_0$  nur schmal.
- Eine breite Verteilung in  $k$  (für  $x_0 = 0$ ) erhält man, wenn man  $(\sigma^2 + \sigma_g^2)$  sehr groß wählt, aber gleichzeitig das Produkt  $\sigma_g^2\sigma^2$  klein gegenüber der Breite der Exponentialfunktion. Dies erreicht man z.B. durch  $\sigma/\sigma_g \ll 1$  und durch  $(k_{\max}\sigma_g\sigma)^2 \approx (\sigma^2 + \sigma_g^2)$ , wobei  $k_{\max}$  ein Maß für die gewünschte Breite der Gabor-Transformierten in  $k$  ist.



**Abbildung C.3:** Darstellung der Gabor Transformierten  $\hat{\varphi}(k, x_0)$  aus (C.16) für  $\sigma = 1$  und  $\sigma_g = 2$ . Von oben nach unten: Betrag, Real- und Imaginärteil

Wir wollen zum Abschluss dieses Anhangs noch eine Bemerkung im Zusammenhang mit der in dieser Arbeit behandelten Theorie machen. In Abschnitt 4.3.5 haben wir eine vereinfachte Version der Gabor-Transformation angewendet, um ein schmales Gaußpaket als Superposition sehr breiter Gaußpakete zu schreiben. Dabei haben wir nur Fensterfunktionen, die um  $x_0 = 0$  zentriert waren, zugelassen. Im allgemeinen kann aber auch die Superposition verschobener Basiswellenpakete mit verschiedenen  $x_0$  interessant für die in dieser Arbeit vorgestellte Theorie sein. Man muss hierbei immer abwägen, ob die Einführung einer weiteren Integrationsvariable  $x_0$  und der damit verbundene numerische Aufwand durch ein evtl. verbessertes Endresultat aufgewogen wird. Eine weitere Option ist auch die Anwendung der oben bereits erwähnten Wavelet-Transformation, siehe z.B. [42]. Wavelets sind Basisfunktionen mit einer festen Anzahl von Schwingungen und variabler Breite. Bei sehr kleinen Wellenlängen, also hoher Ortsauflösung, hat man nur ein sehr schmales Wavelet, während auf großen Skalen (langen Wellenlängen) und somit niedriger Ortsauflösung ein sehr breites Wavelet als Basisfunktion verwendet wird. Das Problem der Überlokalisierung oder Unterlokalisierung, das bei der Gabor-Transformation auftreten kann, wird durch die Verwendung von Wavelets umgangen.

---

# Abbildungsverzeichnis

---

2.1	Schematischer Aufbau eines longitudinalen Atomstrahl-Spinecho-Experiments. . . . .	7
2.2	Anfangswertproblem der Charakteristiken-Lösung . . . . .	13
2.3	Gaußsches Anfangswellenpaket . . . . .	21
3.1	Allgemeines Potential mit einem Sprung bei $z = z_1$ . . . . .	25
3.2	Allgemeines Potential mit einem Wall zwischen $z = z_1$ und $z = z_2$ . . . . .	32
3.3	Zum Zusammenhang mit früheren Arbeiten. . . . .	40
3.4	Ein um $\hat{\zeta} = 0$ zentriertes Gauß-Paket. . . . .	43
3.5	Breit-Rabi-Diagramm für Wasserstoff im $(n = 1)$ -Unterraum . . . . .	45
3.6	Die Potentiale für den polarisierten Zustand $ 1_x\rangle$ . . . . .	47
3.7	Die berechnete Wahrscheinlichkeit $P_{1x}(Z)$ und die Schwerpunktsbewegungen der Teilwellenpakete. . . . .	51
3.8	Theoretisches Spinechosignal für Wasserstoff im Grundzustand (ohne Skalierung). . . . .	53
6.1	Zwei Beispiele zur Anwendung des erweiterten Fahrplanmodells. . . . .	117
6.2	Ein drittes Beispiel zur Anwendung des erweiterten Fahrplanmodells. . . . .	118
6.3	Veranschaulichung der experimentellen Vorgehensweise beim LABSE. . . . .	121
6.4	Die Kreuzungspunkte in Abhängigkeit vom Skalierungsparameter $s$ . . . . .	122
7.1	Die Realteile der geometrischen Flussdichten bei konstantem magnetischen Feld. . . . .	146
7.2	Verhalten einer geschlossenen Kurve unter P-Transformation . . . . .	148
7.3	Ein Integrationsweg für eine rein P-verletzende geometrische Phase . . . . .	149
B.1	Termschema des Wasserstoff-Grundzustands. . . . .	189
B.2	Breit-Rabi-Diagramm für Wasserstoff im $(n = 1)$ -Unterraum . . . . .	191

B.3	Termschema der ( $n = 2$ )-Zustände von Wasserstoff (nicht maßstabsgetreu).	194
B.4	Breit-Rabi-Diagramme für Wasserstoff im ( $n = 2$ )-Unterraum . . . . .	206
B.5	Breit-Rabi-Diagramm für die $2P_{3/2}$ -Zustände von Wasserstoff . . . . .	207
B.6	Abhängigkeit der atomaren Energieniveaus vom elektrischen Feld . . . . .	208
B.7	Abhängigkeit der mittleren Lebensdauern vom elektrischen Feld . . . . .	209
B.8	Termschema der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium (nicht maßstabsgetreu).	212
B.9	Breit-Rabi-Diagramme der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium . . . . .	228
B.10	Energieniveaus der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium im elektrischen Feld	229
B.11	Lebensdauern der ( $n = 2$ )-Zustände von Deuterium im elektrischen Feld .	231
C.1	Veranschaulichung der Gabor Transformation . . . . .	234
C.2	Drei repräsentative „Noten“ . . . . .	236
C.3	Beispiel: Gabor-Transformierte . . . . .	237

---

# Tabellenverzeichnis

---

4.1	Untere Schranken für die Breite der Wellenpakete für die Gültigkeit der WKB-Näherungslösung. . . . .	78
B.1	Die Matrix der dritten Komponente des magn. Moments für Wasserstoff im Grundzustand . . . . .	190
B.2	Die Massenmatrix für Wasserstoff im Grundzustand . . . . .	190
B.3	Eigenwerte und Eigenvektoren der Massenmatrix . . . . .	190
B.4	Die $k$ -fach abgeleitete Massenmatrix $\partial_Z^k \mathcal{M}(Z)$ . . . . .	192
B.5	Die Matrix $\underline{\mathcal{D}}^{(1)}(Z)$ . . . . .	192
B.6	Die Matrix $\underline{\mathcal{D}}^{(2)}(Z)$ . . . . .	193
B.7	Skalierung der Hyperfeinaufspaltung für Wasserstoff mit $n \leq 2$ . . . . .	193
B.8	Die freie, nichthermitesche Massenmatrix für Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	195
B.9	Die Matrix $\underline{\mu}_1$ der ersten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	197
B.10	Die Matrix $\underline{\mu}_2$ der zweiten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	198
B.11	Die Matrix der dritten Komponente des magnetischen Moments von Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	200
B.12	Die Matrix $\underline{D}_1$ der ersten Komponente des Dipolmoments von Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	201
B.13	Die Matrix $\underline{D}_2$ der zweiten Komponente des Dipolmoments von Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	202
B.14	Die Matrix der dritten Komponente des Dipoloperators von Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	204
B.15	Zuordnung der verschiedenen Notationen für Wasserstoff im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	205
B.16	Skalierung der Hyperfeinaufspaltung für Deuterium mit $n \leq 2$ . . . . .	212

---

B.17 Die freie, nichthermitesche Massenmatrix für Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	213
B.18 Die Matrix $\underline{\mu}_1$ der ersten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	215
B.19 Die Matrix $\underline{\mu}_2$ der zweiten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	217
B.20 Die Matrix der dritten Komponente des magnetischen Moments von Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	219
B.21 Die Matrix $\underline{D}_1$ der ersten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	221
B.22 Die Matrix $\underline{D}_2$ der zweiten Komponente des Dipolmoments von Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	223
B.23 Die Matrix der dritten Komponente des Dipoloperators von Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	225
B.24 Zuordnung der verschiedenen Notationen für Deuterium im $(n = 2)$ -Unterraum . . . . .	227

---



# Literaturverzeichnis

---

- [1] A. Michelson, „The relative motion of the earth and the luminiferous aether“, *Amer. J. Sci.* **22** (1881).
- [2] A. Michelson und E. Morley, „On the the relative motion of the earth and the luminiferous aether“, *Amer. J. Sci.* **34** (1887).
- [3] L. de Broglie, „Recherches sur la Théorie des Quanta“, *Ann. de Phys.*, 10<sup>e</sup> série, **III** (1925).
- [4] J. Estermann und O. Stern, „Diffraction of molecular rays“, *Z. Phys.* **61** (1930) 91–125.
- [5] L. Marton, „Electron interferometer“, *Phys. Rev.* **85** (1952) 1057.
- [6] L. Marton, J. Simpson und J. Suddeth, „An electron interferometer“, *Rev. Sci. Instr.* **25** (1954) 1099.
- [7] H. Maier-Leibnitz und T. Springer, „Interferometer für langsame Neutronen“, *Z. Phys.* **167** (1962) 386–402.
- [8] H. Rauch, W. Treimer und U. Bonse, „Test of a single crystal neutron interferometer“, *Phys. Rev. A* **47** (1974) 369–371.
- [9] D. Keith, C. Ekstrom, Q. Turchette und D. Pritchard, „An interferometer for atoms“, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991), Nr. 21, 2693–2696.
- [10] D. Pritchard, A. Cronin, S. Gupta und D. Kokorowski, „Atom optics: Old ideas, current technology and new results“, *Annalen der Physik* **10** (2001), Nr. 1-2, 35–54.
- [11] P. Berman, (Hrsg.), *Atom Interferometry*. Academic Press, San Diego, 1997.
- [12] M. DeKieviet, D. Dubbers, C. Schmidt, D. Scholz und U. Spinola, „<sup>3</sup>He spin echo: A new atomic beam technique for probing phenomena in the neV range“, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 1919.

- [13] A. Reiner, „Aufbau und Test einer Wasserstoff- und Deuteriumstrahlspinechomaschine“, Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 1998. (unveröffentlicht).
  - [14] M. DeKieviet, S. Hafner und A. Reiner, „Hydrogen and deuterium atomic beam spin echo“, (*to be published*).
  - [15] M. DeKieviet, D. Dubbers, M. Klein, C. Schmidt und M. Skrzypczyk, „Surface science using molecular beam spin echo“, *Surf. Sci.* **377-379** (1997) 1112.
  - [16] T. Lee und C. Yang, „Question of parity conservation in weak interactions“, *Phys. Rev.* **104** (1956), Nr. 1, 254–258.
  - [17] S. Weinberg, „A model of leptons“, *Phys. Rev. Lett.* **19** (1967) 1264–1266.
  - [18] A. Salam, in *Proceedings of the Eighth Nobel Symposium on Elementary Particle Theory*, N. Svartholm, (Hrsg.). Almquist and Wiskell, Stockholm, 1968.
  - [19] S. Glashow, L. Iliopoulos und L. Maiani, „Weak interactions with lepton-hadron symmetry“, *Phys. Rev. D* **2** (1970) 1285–1292.
  - [20] D. Haidth, „The discovery of the neutral currents“, *Eur. Phys. Journal C* **34** (2004), Nr. 1, 25–31.
  - [21] Y. B. Zel’dovich, *Sov. Phys. JETP* **9** (1959) 682.
  - [22] D. Budker, „Parity nonconservation in atoms“, in *Physics beyond the Standard Model, proceedings of the Fifth International WEIN Symposium*, P. Herzceg, C. Hoffman und H. Klapdor-Kleingrothaus, (Hrsg.), pp. 418–441. World Scientific, Singapore, 1999.
  - [23] M. A. Bouchiat und C. Bouchiat, „Parity violation induced by weak neutral currents in atomic physics“, *J. Phys. (Paris)* **35** (1974) 899.
  - [24] L. Barkov und M. Zolotarev, „Parity violation in atomic bismuth“, *Phys. Lett. B* **85** (1979) 308–313.
  - [25] R. Conti, P. Bucksbaum, S. Chu, E. Commins und L. Hunter, „Preliminary observation of parity nonconservation in atomic thallium“, *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979) 343–346.
  - [26] M. Bouchiat und C. Bouchiat, „Parity violation in atoms“, *Rep. Prog. Phys.* **60** (1997) 1351–1396.
  - [27] J. Guena, M. Lintz und M. Bouchiat, „Atomic parity violation : Principles, recent results, present motivations“, *Mod. Phys. Lett. A* **20** (2005), Nr. 6, 375.
-

- 
- [28] J. Ashman (EMC) *et al.*, „A measurement of the spin asymmetry and determination of the structure function  $g(1)$  in deep inelastic muon-proton scattering“, *Phys. Lett.* **206B** (1988) 364.
- [29] J. Ashman (EMC) *et al.*, „An investigation of the spin structure of the proton in deep inelastic scattering of polarized muons on polarized protons“, *Nucl. Phys.* **B 328** (1989) 1.
- [30] E. Aschenauer und I. Flegel, „HERMES looks for final pieces in nucleon-spin puzzle“, *CERN Courier* **46** (April, 2006).
- [31] G. W. Botz, D. Bruss und O. Nachtmann, „Polarization rotation effects due to parity violation in atoms“, *Ann. Phys.* **240** (1995) 107–202, [hep-ph/9406222](#).
- [32] W. Bernreuther und O. Nachtmann, „A new way to measure parity violating effects in atomic systems“, *Z. Phys.* **A309** (1983) 197.
- [33] T. Gasenzer, „Paritätsverletzende Energieverschiebungen und Berry-Phasen in Atomen“, Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 1998. (unveröffentlicht).
- [34] D. Bruss, T. Gasenzer und O. Nachtmann, „Parity violating energy shifts and berry phases in atoms. I“, *Eur. Phys. J. direct* **D1** (1999) 2, [hep-ph/9802317](#).
- [35] T. Gasenzer und O. Nachtmann, „Large parity violating effects in atomic dysprosium with nearly degenerate floquet eigenvalues“, *Eur. Phys. J.* **D 12** (2000) 95–110.
- [36] T. Bergmann, „Paritätsverletzende Polarisations-Rotationen von Deuterium in elektrischen Feldern“, Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 2003. (unveröffentlicht).
- [37] J. Mathews und R. L. Walker, *Mathematical Methods of Physics*. W. A. Benjamin Inc., New York, 1970.
- [38] O. Nachtmann, „High energy collisions and nonperturbative QCD“, [hep-ph/9609365](#).
- [39] A. Messiah, *Quantenmechanik*, Bd. 1 and 2. de Gruyter, Berlin, New York, 2. Aufl., 1991.
- [40] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloë, *Quantenmechanik*, Bd. 1 and 2. de Gruyter, Berlin, New York, 2. Aufl., 1999.
- [41] D. Gabor, „Theory of communication“, *Journal of the Institute of Electrical Engineers* **93** (1946), Nr. III, 429–457.
-

- 
- [42] G. Kaiser, *A Friendly Guide To Wavelets*. Birkhäuser, Boston, 1994.
- [43] V. Weisskopf und F. Wigner, *Z. Phys.* **65** (1930) 18.
- [44] O. Nachtmann, *Phänomene und Konzepte der Elementarteilchenphysik*. Vieweg, Braunschweig, 2. Aufl., 1991.
- [45] M. V. Berry, „Quantal phase factors accompanying adiabatic changes“, *Proc. R. Soc. Lond.* **A392** (1984) 45–57.
- [46] H. Flanders, *Differential Forms*, Bd. 11 aus *Mathematics in Science and Engineering*. Academic Press, New York, 1963.
- [47] H. Cycon, R. Froese, W. Kirsch und B. Simon, *Schrödinger Operators*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1987.
- [48] E. Freitag und R. Busam, *Funktionentheorie 1*. Springer, Berlin, Heidelberg, 3. Aufl., 2000.
- [49] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., New York etc., 3. Aufl., 1999.
- [50] H. Bethe und E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1957.
- [51] C. Bouchiat, „Parity violation in atomic processes“, *J. of Physics* (1977) 183–197.
- [52] A. R. Edmonds, *Drehimpulse in der Quantenmechanik*. B. I. Hochschultaschenbücher, Mannheim, 1964.
- [53] T. Kinoshita, (Hrsg.), *Quantum Electrodynamics*, Bd. 7 aus *Advanced Series on Directions in High Energy Physics*. World Scientific, Singapore, 1990.
- [54] N. Kolachevsky, M. Fischer, S. Karshenboim und T. Hänsch, „High-precision optical measurement of the 2S hyperfine interval in atomic hydrogen“, *Phys. Rev. Lett* **92** (2004), Nr. 3, 033003.
- [55] H. Hellwig *et al.*, *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **IM-19** (1970) 200.
- [56] V. G. Pal’chikov, Y. L. Sokolov und V. P. Yakovlev, „Measurement of the Lamb Shift in H,  $n = 2$ “, *Metrologia* **21** (1985) 99–105.
- [57] G. W. Erickson, „Energy levels of one-electron atoms“, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **6** (1977) 831.
- [58] G. W. F. Drake, „Spontaneous two-photon decay rates in hydrogenlike and heliumlike ions“, *Phys. Rev.* **A34** (1986), Nr. 5, 2871.
-

- 
- [59] D. J. Wineland und N. F. Ramsey, „Atomic deuterium maser“, *Phys. Rev.* **A5** (1972), Nr. 2, 821.
- [60] L. Fang und R. Thews, (Hrsg.), *Wavelets in Physics*. World Scientific Publishing, Singapore, 1998.
-



# Danksagung

---

Meinem Betreuer Prof. Dr. Otto Nachtmann möchte ich von ganzem Herzen danken, dass er mich nach meiner Diplomarbeit, die ich zuvor in seiner Arbeitsgruppe durchgeführt habe, auch als Doktorand angenommen hat. Sein Vertrauen in mich war und ist auch heute noch eine zusätzliche Motivation für mich. Seine ruhige und zuversichtliche Art führte zu der entspannten Arbeitsatmosphäre, in der sich ein junger Geist erst frei entfalten kann. Stets konnte ich mich auf seine Unterstützung und bewundernswerte fachliche Kompetenz beim Lösen von Problemen verlassen, sei es nun bei den Formeln dieser Arbeit oder bei der langfristigen Sicherung meiner Finanzierung. Herr Nachtmann hat sich dabei immer auch für das Wohlergehen meiner Familie interessiert und eingesetzt, wofür ich ihm besonders dankbar bin.

Herrn Priv.-Doz. Maarten DeKieviet, PhD., möchte ich für seinen bereitwilligen Einsatz als Zweitgutachter danken, darüberhinaus aber auch für viele interessante und fruchtbare Diskussionen über die Möglichkeiten der Atomstrahl-Spinecho-Methode. Seine lockere und ungezwungene Art machten die Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment zu einer Freude.

Herr Priv.-Doz. Dr. Thomas Gasenzer danke ich für zahlreiche Diskussionen über die Theorie der Paritätsverletzung in Atomen, er war für mich ein Mentor und Freund. Besonders danken möchte ich ihm für seine wertvollen Tipps bei der Erstellung eines Vortrags für die DPG-Frühjahrstagung, sowie für das Lesen und konstruktive Kritisieren der Zusammenfassung dieser Arbeit.

Dieter Greiner danke ich für viele Diskussionen über unser gemeinsames Arbeitsgebiet. Er stellte mir oft die Fragen, die ich mir selbst schon längst hätte stellen müssen. Bei der Betreuung seiner Diplomarbeit musste ich über viele, lange zurückliegende Dinge noch einmal in einem neuen Licht nachdenken, was mir oft geholfen hat, sie klarer zu sehen. Darüberhinaus bedanke ich mich für das Korrekturlesen der Einleitung und Zusammenfassung dieser Arbeit.

Vielen weiteren Personen möchte ich danken für die schöne gemeinsame Zeit, die interessanten oder auch einfach nur netten Gespräche, die zu der schönen Atmosphäre im Institut beigetragen haben: Thorsten Zöller, Andreas von Manteuffel, Juliane Behrend, Thomas Bittig, Sebastian Scheffler, Wolfgang Unger, Urs Bergmann und allen, die ich an

dieser Stelle vergessen habe, die sich aber dennoch angesprochen fühlen.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die finanzielle Förderung meiner Arbeit, die mich und meine Familie ernährt.

Ich danke Kaffee, weil ich es ohne ihn nicht geschafft hätte, wach zu bleiben oder mich zu konzentrieren. Ich danke außerdem dem Internet und meinen Kollegen vom Sim-Racing-Team „°HoT“, die für Zerstreuung in meiner Freizeit gesorgt haben. Den Komponisten James Horner, James Newton Howard, Hans Zimmer und Alan Silvestri danke ich für ihre wunderschöne Filmmusik, die mir beim stundenlangen Schreiben geholfen hat.

Meinen Eltern danke ich für alles, was sie für mich getan haben. Ihr habt mir immer die nötigen Freiheiten gelassen, mich in Liebe erzogen und mir ein Gefühl für das gegeben, was im Leben wichtig ist, was richtig und was falsch ist. Ihr habt mich bis zum heutigen Tage gefördert und unterstützt, finanziell wie moralisch. Mein besonderer Dank gilt meinem kürzlich verschiedenen Großvater Wilhelm Hesse, der immer für mich da war. Seine Lebenswürdigkeit, Aufrichtigkeit, Ehrlichkeit und Treue werden mir stets in Erinnerung bleiben und mir ein Vorbild sein.

Liebste Dajana, Dir möchte ich für alles danken, was Du bist und was Du mir gibst. Ohne Deinen Rückhalt und Dein positives Wesen, Deine Liebe und Dein Vertrauen in mich hätte ich das hier niemals geschafft.

Liebe Elena, Dir danke ich dafür, dass es Dich gibt. Danke, dass Du mich immer wieder verblüffst, dass Du mir den Spiegel vorhältst, wie das nur ein Kind kann und dass mich Dein Lächeln stets daran erinnert, was im Leben wirklich zählt.

*Dossenheim, Mai 2006*

---